

ALEXANDRE MIKOWSKI

**ESTUDO DA DINÂMICA DA ZONA PLÁSTICA AO REDOR DA PONTA DA
TRINCA SOB DIFERENTES MODOS DE CARREGAMENTO**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Dr. Francisco Carlos Serbena

Co-orientador: Dr. Carlos Maurício Lepiensi

CURITIBA

2002

**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

PARECER

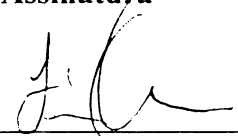
Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado do estudante **Alexandre Mikowski** são de parecer favorável e consideram aprovado a redação final da Defesa de Dissertação cujo título é **Estudo da Dinâmica da Zona Plástica ao Redor da Ponta da Trinca sob Diferentes Modos de Carregamento**.

Curitiba, 7 de março de 2002.

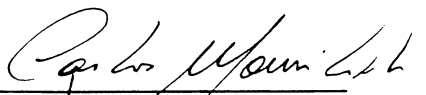
Banca Examinadora

Assinatura

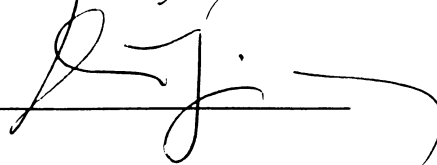
**Prof. FRANCISCO CARLOS SERBENA
(Orientador/Presidente) (UFPR)**



**Prof. CARLOS MAURÍCIO LEPIENSKI
(UFPR)**



**Prof. DIRCEU SPINELLI
(EESC-USP)**

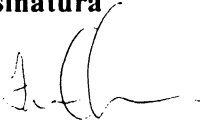
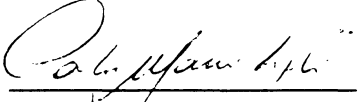
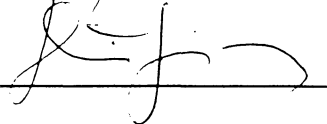


ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ALEXANDRE MIKOWSKI

TITULO: “ESTUDO DA DINÂMICA DA ZONA PLÁSTICA AO REDOR DA PONTA DA TRINCA SOB DIFERENTES MODOS DE CARREGAMENTO.”

Em Sessão Pública iniciada às quatorze horas, nesta data, após um Seminário sob o título acima, e posterior argüição por esta banca examinadora, esta decidiu atribuir ao candidato o conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
Prof. FRANCISCO CARLOS SERBENA (Orientador/Presidente) (UEPB)	 _____	<u>A</u>
Prof. CARLOS MAURÍCIO LEPIENSKI (UFPR)	 _____	<u>A</u>
Prof. DIRCEU SPINELLI (EESC-USP)	 _____	<u>A</u>

Curitiba, 7 de março de 2003.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à Jordanni Gelaki, *in memoriam*, por todos os momentos de alegria e diversão em que convivemos juntos e pela consideração e respeito que tínhamos um pelo outro.

Obrigado por tudo, nesta sua breve passagem pelo mundo!

AGRADECIMENTOS

➤ Dr. Francisco Carlos Serbena

Pela elaboração e orientação deste trabalho, pois você foi mais que profissional, foi amigo compreensivo nos momentos mais difíceis desta caminhada.

➤ Dr. Carlos Eugênio Foerster

Por gentilmente ter cedido o computador do projeto PROCAD, para a realização de algumas simulações numéricas.

➤ A CAPES

Pela bolsa de estudos.

➤ Aos meus pais, aos meus irmãos e a minha noiva Susana

Pela compreensão que tiveram nos momentos de ausência, pelo apoio e carinho que sempre me dedicaram.

➤ Aos amigos e colegas da Pós-Graduação

Pelo companheirismo.

➤ Aos tios Brasil e Janice Bahls

Por me receberem em sua casa, pela inestimável amizade.

➤ A todos aqueles que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

Muito Obrigado.

*Pouco conhecimento faz que as criaturas se sintam
orgulhosas.
Muito conhecimento, que se sintam humildes.
É assim que as espigas sem grãos erguem
desdenhosamente a cabeça para o céu, enquanto que
as cheias a baixam para a terra, sua mãe.*

Leonardo da Vinci

SUMÁRIO

<i>LISTA DE FIGURAS E ILUSTRAÇÕES</i>	viii
<i>LISTA DE TABELAS</i>	xi
<i>LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIACÕES</i>	xii
<i>RESUMO</i>	xx
<i>ABSTRACT</i>	xxi
1. INTRODUÇÃO	1
2. MECÂNICA DA FRATURA: CONCEITOS FUNDAMENTAIS	6
2.1. <i>TEORIA ELEMENTAR DE DISCORDÂNCIAS</i>	6
2.1.1 <i>Discordâncias em cunha e em hélice</i>	6
2.1.2 <i>Fonte de discordâncias: o mecanismo de Frank-Read</i>	7
2.1.3 <i>Tensão imagem</i>	8
2.1.4 <i>Tensão de interação</i>	9
2.2. <i>FRATURA</i>	10
2.2.1 <i>Fratura Frágil</i>	10
2.2.2 <i>Fratura Semi-Frágil</i>	10
2.2.3 <i>Fratura Dúctil</i>	11
2.3. <i>FATOR DE CONCENTRAÇÃO DE TENSÃO</i>	11
2.4. <i>BALANÇO DE ENERGIA DE GRIFFITH</i>	12
2.5. <i>TAXA DE LIBERAÇÃO DE ENERGIA</i>	14
2.6. <i>CAMPO DE TENSÃO NA PONTA DA TRINCA E OS MODOS DE CARREGAMENTO</i>	15
2.7. <i>INTERAÇÕES: TRINCA-DISCORDÂNCIAS</i>	16
2.7.1 <i>Embotamento</i>	16
2.7.2 <i>Blindagem</i>	17
2.8. <i>ZONA PLÁSTICA NA PONTA DA TRINCA</i>	18
2.8.1 <i>Correção de Irwin para a zona plástica</i>	18
2.8.2 <i>Aproximação de Dugdale para a zona plástica</i>	19
2.8.3 <i>A forma da zona plástica</i>	20
2.9. <i>TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL</i>	23
3. MODELOS DA TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL	27

3.1. MODELOS QUE CONSIDERAM A PROPAGAÇÃO DA TRINCA.....	27
3.2. MODELOS QUE CONSIDERAM A TRINCA ESTÁTICA	27
3.2.1 Emissão de Discordâncias pela Ponta da Trinca	27
3.2.2 Interação da Zona Plástica com a Trinca - Modelo Estático	28
3.2.3 Interação da Zona Plástica com a Trinca - Modelo Dinâmico.....	36
3.3. RESUMO DOS PRINCIPAIS MODELOS DA TRANSIÇÃO FGRÁGIL - DÚCTIL	41
4. SIMULAÇÕES NUMÉRICAS.....	42
4.1. DESCRIÇÃO DO MODELO USADO NAS SIMULAÇÕES	42
4.2. COMPARAÇÃO ENTRE OS MODOS DE CARREGAMENTO SEGUNDO O MODELO HRS	47
5. MODELOS ANALÍTICOS	51
5.1. FORMULAÇÃO DO MODELO ANALÍTICO PARA OS MODOS II E III	51
5.2. FORMULAÇÕES DOS MODELOS ANALÍTICOS PARA O MODO I.....	57
5.2.1 Modelo Analítico segundo o modelo HRS.....	57
5.2.2 Modelo Analítico segundo o modelo CK.....	59
5.3. EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA OS MODOS DE CARREGAMENTO	62
5.3.1 O Tamanho da Zona Plástica.....	62
5.3.2 A Tensão ao Longo da Zona Plástica.....	63
5.3.3 O Número Total de Discordâncias.....	64
5.3.4 O Fator de Intensidade de Tensão Efetivo Local.....	66
5.4. EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA UMA TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL SUAVE.....	67
5.5. RESUMO DOS MODELOS DESENVOLVIDOS NESTE TRABALHO	70
6. COMPARAÇÕES ENTRE SIMULAÇÕES NUMÉRICAS E MODELOS ANALÍTICOS.....	73
6.1. COMPARAÇÕES PARA O MODO I	74
6.2. COMPARAÇÕES PARA O MODO III.....	84
6.3. COMPARAÇÕES ENTRE AS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS SEGUNDO O MODELO HRS COM O MODELO ANALÍTICO DINÂMICO DESTE TRABALHO PARA OS MODOS II E III	90
6.4. SIMULAÇÕES NUMÉRICAS SEGUNDO O MODELO HRS PARA O MODO I	99
6.4.1 Estudos das Variações da Temperatura, da Taxa de Carregamento e do Expoente da Tensão.....	99
6.4.2 Estudo do Termo de Interação entre Discordâncias.....	105
6.4.3 Curvas Universais para o Modo I.....	108

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	115
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	119

LISTA DE FIGURAS E ILUSTRAÇÕES

<i>Figura 1.1 Fratura catastrófica ocorrida em 20/11/2002 no petroleiro Prestige, que levava 77 mil toneladas de óleo combustível e afundou cerca de 250 km da costa noroeste da Espanha [7].....</i>	<i>2</i>
<i>Figura 2.1 – Discordância em cunha e em hélice obtidas a partir de um cristal perfeito [3].....</i>	<i>7</i>
<i>Figura 2.2 – Diagrama representativo do movimento das discordâncias em laço formadas pelo mecanismo de Frank-Read [14].....</i>	<i>8</i>
<i>Figura 2.3 – Discordâncias em hélice em (a), e em cunha em (b) a uma distância d da superfície $x = 0$. A discordância imagem está em uma distância d da superfície [14].....</i>	<i>9</i>
<i>Figura 2.4 - Cavidade central elíptica em uma placa tensionada [6].....</i>	<i>12</i>
<i>Figura 2.5 – Trinca em uma placa infinita sujeita a uma tensão de tração remota [6].....</i>	<i>13</i>
<i>Figura 2.6 – Definição do eixo de coordenada na ponta da trinca. A direção z é normal à página [6]....</i>	<i>15</i>
<i>Figura 2.7 – Os três modos de carregamento que podem ser aplicados a uma trinca [3].....</i>	<i>16</i>
<i>Figura 2.8 – Ponta da trinca embotada pela emissão de uma discordância em cunha [11,19].....</i>	<i>17</i>
<i>Figura 2.9 – Correção para a zona plástica (segundo Irwin) [21].....</i>	<i>18</i>
<i>Figura 2.10 – Aproximação para a zona plástica (segundo Dugdale) [3].....</i>	<i>20</i>
<i>Figura 2.11 – Formas da zona plástica, para o modo I, em (a) segundo o critério de Von Mises e em (b) segundo o critério de Tresca [21].....</i>	<i>22</i>
<i>Figura 2.12 – Formas da zona plástica, para os modos II e III, segundo o critério de escoamento de Von Mises [21].....</i>	<i>23</i>
<i>Figura 2.13 – A tensão σ em função da temperatura T, mostra a transição frágil-dúctil de maneira abrupta do silício. O símbolo representado por um círculo indica um comportamento frágil por parte do material, o quadrado indica um comportamento dúctil e o triângulo indica a região de transição [11,26-28].....</i>	<i>24</i>
<i>Figura 2.14 – Logaritmo neperiano da taxa de carregamento em função do inverso da temperatura crítica da transição frágil-dúctil para diferentes experimentos em silício [28]. A-C Brede & Haasen (1989); D St John (1975); E-F Michot & George (1986, 1993); G-H Samuels & Roberts (1989).....</i>	<i>25</i>
<i>Figura 2.15 – Tenacidade à fratura K_{crit} de monocristais de tungstênio pré-trincados como função da temperatura T para diferentes taxas de carregamentos dK/dt ($MPa.m^{1/2}.s^{-1}$) [33,34].....</i>	<i>25</i>
<i>Figura 3.1 – Modelo de Chang & Ohr para uma trinca elasto-plástica que inclui a zona livre de discordâncias DFZ. As zonas plásticas são formadas por distribuições contínuas de discordâncias em cunha para a trinca carregada em modo II.....</i>	<i>31</i>
<i>Figura 3.2 – Configuração do empilhamento de discordâncias próximo a ponta da trinca em um plano inclinado [44].....</i>	<i>34</i>
<i>Figura 3.3 – Modelo proposto para os modos III e I de carregamento. Laços de discordâncias são emitidos das fontes em X e Y, e viajam na frente da trinca para blindar o ponto Z [11].....</i>	<i>38</i>

<i>Figura 4.1 – Em (a) uma trinca é carregada em modo I e discordâncias em cunha são emitidas em um plano perpendicular ao plano da trinca, em (b) uma trinca é carregada em modo II e discordâncias são emitidas em um plano coplanar ao plano da trinca e em (c) a trinca é carregada em modo III e discordâncias em hélice são emitidas em um plano coplanar ao plano da trinca.....</i>	<i>43</i>
<i>Figura 4.2 – Em (a), (b) e (c) são apresentados os gráficos da tensão total e as contribuições de seus termos em função da posição ao longo da zona plástica.....</i>	<i>47</i>
<i>Figura 4.3 – Em (a)-(e) são mostrados os gráficos do tamanho da zona plástica, tensão ao longo da zona plástica, número de discordâncias, fator de intensidade de tensão efetivo local, tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada. Em (f) é mostrada a função de distribuição de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.....</i>	<i>49</i>
<i>Figura 5.1 – (a) Zona plástica composta por discordâncias em hélice e fontes de discordâncias na ponta da trinca em modo III e (b) representação unidimensional da zona plástica dependente do tempo [11]..</i>	<i>52</i>
<i>Figura 6.1 – Em (a) gráfico do número de discordância e em (b) o fator de intensidade de tensão efetiva local, ambos em função da tensão ao longo da zona plástica.....</i>	<i>77</i>
<i>Figura 6.2 – Gráfico da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo do plano de deslizamento.....</i>	<i>79</i>
<i>Figura 6.3 – Em (a) gráfico do tamanho da zona plástica e em (b) gráfico da tensão ao longo da zona plástica, ambos em função do fator de intensidade de tensão aplicada para $m = 1$ e $T = 473$ K.....</i>	<i>81</i>
<i>Figura 6.4 – Em (a) tamanho da zona livre de discordâncias, em (b) número de discordâncias e em (c) fator de intensidade de tensão efetivo local, ambos em função do fator de intensidade de tensão aplicada para $m = 1$ e $T = 473$ K.....</i>	<i>82</i>
<i>Figura 6.5 – Comparação entre os modelos de Majumdar & Burns e Ohr por meio de gráfico normalizado da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.....</i>	<i>85</i>
<i>Figura 6.6 – Comparação entre os modelos de Hirsch et al, Majumdar & Burns e Ohr por meio de gráfico normalizado da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.....</i>	<i>86</i>
<i>Figura 6.7 – Em (a), comparação entre os modelos de Hirsch et al, este trabalho e Chang & Ohr por meio de gráfico do fator de intensidade de tensão efetivo local em função da tensão ao longo da zona plástica. Em (b), gráfico das contribuições da tensão em função da posição ao longo da zona plástica, para o modelo de Hirsch et al.....</i>	<i>89</i>
<i>Figura 6.8 – Variação da temperatura para os modos II e III. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>92</i>
<i>Figura 6.9 – Variação da taxa de carregamento para os modos II e III. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>93</i>
<i>Figura 6.10 – Variação da temperatura. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>94</i>

<i>Figura 6.11 – Variação da taxa de carregamento. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>95</i>
<i>Figura 6.12 – Variação do expoente da tensão. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>96</i>
<i>Figura 6.13 – Variação do expoente da tensão para os modos II e III. Gráficos em (a) da tensão ao longo da zona plástica e em (b) do tamanho da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>97</i>
<i>Figura 6.14 – Variação da temperatura para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>100</i>
<i>Figura 6.15 – Variação da temperatura para o modo I. Gráficos em (a) do número de discordâncias, em (b) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (c) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>101</i>
<i>Figura 6.16 – Variação da taxa de carregamento para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>102</i>
<i>Figura 6.17 – Variação da taxa de carregamento para o modo I. Gráficos em (a) do número de discordâncias, em (b) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (c) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>103</i>
<i>Figura 6.18 – Variação do expoente da tensão para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>104</i>
<i>Figura 6.19 – Variação dos termos da tensão de interação para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>106</i>
<i>Figura 6.20 – Variação dos termos da tensão de interação para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (b) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.....</i>	<i>107</i>
<i>Figura 6.21 – Curva universal para o modo I. Gráfico do logaritmo neperiano de (a / e) em função de $(K_e / \sigma \cdot e^{1/2})$, para diferentes valores de temperatura.....</i>	<i>109</i>
<i>Figura 6.22 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 1.....</i>	<i>110</i>
<i>Figura 6.23 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 2.....</i>	<i>111</i>
<i>Figura 6.24 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 3.....</i>	<i>112</i>

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 3.1 – Resumo dos principais modelos da transição frágil-dúctil.....</i>	<i>41</i>
<i>Tabela 5.1 – Resumo dos modelos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.....</i>	<i>70</i>
<i>Tabela 5.2 – Equações do tamanho e da tensão ao longo da plástica obtidas dos modelos analíticos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.....</i>	<i>71</i>
<i>Tabela 5.3 – Equações do número de discordâncias e do fator de intensidade de tensão efetivo local obtidas dos modelos analíticos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.....</i>	<i>72</i>
<i>Tabela 6.1 – Número de discordâncias presentes na zona plástica para o modo I de carregamento, referente ao gráfico da figura 6.5.....</i>	<i>85</i>
<i>Tabela 6.2 – Expoente do tamanho da zona plástica (equação 6.24) para os modos II e III.....</i>	<i>98</i>
<i>Tabela 6.3 – Valores numéricos das constantes das equações 6.32 a 6.34, obtidas por ajuste dos mínimos quadrados, para o modo I.....</i>	<i>113</i>
<i>Tabela 6.4 – Expoente do tamanho da zona plástica e constante D (equação 6.35) para o modo I.....</i>	<i>114</i>

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIACÕES

SÍMBOLOS

A	área da trinca
A	argumento das integrais elípticas incompletas
A	constante da velocidade da discordância
A	ponto na ponta da cavidade elíptica
AA	linha de imperfeições
A_d	argumento das integrais elípticas incompletas devido a blindagem
A_I	constante numérica do modo I
Al_2O_3	óxido de alumínio
a	tamanho da zona plástica
a(t)	tamanho da zona plástica dependente do tempo
a_1	tamanho da zona plástica no modelo CO
a_I	expoente numérico do modo I
a	semi-eixo maior da elipse
2a	comprimento da trinca estreita ou elíptica
B	boro
B	espessura da placa
B_I	constante numérica do modo I
b	semi-eixo menor da elipse
b	vetor de Burgers
b_T	vetor de Burgers total
b_I	expoente numérico do modo I
C	constante da expressão da taxa de deformação

C	constante arbitrária da equação integral para os modos II e III
C_a	constante algébrica do modelo analítico dos modos II e III
C_I	constante numérica do modo I
$^{\circ}C$	graus Celsius
c	trinca
c_I	expoente numérico do modo I
D	argumento das integrais elípticas incompletas
D	constante arbitrária da equação integral para o modo I segundo modelo HRS
D_a	constante algébrica para o modo I segundo o modelo HRS
DD'	linha de discordância
d	distância da discordância a superfície
d_c	distância em que os segmentos de discordância em laço são cancelados
$2d_c$	distância entre as fontes de discordâncias
$dn(t)/dt$	taxa do número de discordâncias geradas por fontes no tempo t
E	módulo de elasticidade
$E(\pi/2,k)$	integral elíptica completa de 2 ^a classe
$E(\phi,k)$	integral elíptica incompleta de 2 ^a classe
$E(\pi/2,m)$	integral elíptica completa de 2 ^a classe
$E(D,m)$	integral elíptica incompleta de 2 ^a classe
e	tamanho da zona livre de discordâncias
e_1	tamanho da zona livre de discordâncias no modelo CO
$F(\pi/2,k)$	integral elíptica completa de 1 ^a classe
$F(\phi,k)$	integral elíptica incompleta de 1 ^a classe
$F(\pi/2,m)$	integral elíptica completa de 1 ^a classe
$F(D,m)$	integral elíptica incompleta de 1 ^a classe
$f(x)$	função distribuição de discordâncias para os modos II e III

$f(x,t)$	função distribuição contínua de discordâncias
$f(y)$	função distribuição de discordâncias para o modo I
$f(r)$	função distribuição de discordâncias no modelo CK
$f(\theta)$	função angular
f_{tot}	força total atuando em cada discordância
f_{Kd}	força causada pelo fator de intensidade de tensão aplicada
f_{dd}	força imagem devido à presença da superfície livre da trinca
$f_{dd'}$	força de interação com todas as outras discordâncias
f_{fric}	força de atrito devido a rede unidimensional de discordâncias
G	taxa de liberação de energia
Ge	germânio
G_c	valor crítico da taxa de liberação de energia, ou seja, a tenacidade à fratura
I	constante arbitrária da equação integral para o modo I segundo modelo CK
I_a	constante algébrica para o modo I segundo o modelo CK
i	subscrito que indica o modo de carregamento, $i = I, II$ ou III
i	número complexo
J	integral de contorno de Rice
K	fator de intensidade de tensão
K	graus Kelvin
K_{crit}	tenacidade à fratura
K_e	fator de intensidade de tensão efetivo local
K_i	fator de intensidade de tensão aplicado
$K_{ij}^D(\theta)$	função angular
K_N	fator de intensidade de tensão de nucleação de discordância
K_o	fator de intensidade de tensão crítica
K_{si}	fator de intensidade de tensão devido ao efeito de blindagem

K_t	fator de concentração de tensão
K_{IC}	tenacidade à fratura do material em estudo
dK_1/dt	taxa de carregamento
dK_2/dt	taxa de carregamento
k	módulo das integrais elípticas
k	constante de Boltzmann
L_d	constante algébrica da expressão de blindagem dos modos II e III
L_k	constante algébrica da expressão de blindagem dos modos II e III
M	prefixo mega, 10^6
Mo	molibdênio
MgO	óxido de magnésio
m	expoente da tensão
m	módulo das integrais elípticas
m	unidade de comprimento, metro
N	número de discordâncias agrupadas
$NaCl$	cloreto de Sódio
$NiAl$	liga intermetálica - 50 at.% de níquel e 50 at.% de alumínio
n	número de discordâncias
$n!$	fatorial de n , onde n é o número de superdiscordâncias
Pa	unidade de pressão, Pascal
Q	parâmetro das integrais elípticas incompletas
R	tamanho da zona plástica no modelo de Dugdale
$R(\alpha)$ e $R(u)$	funções de distribuição de discordâncias dos modelos analíticos
r	raio, 1ª coordenada polar
r	distância radial
r	distância entre discordância e a ponta da trinca

r_c	raio crítico para emissão do laço de discordância
r_p^*	raio da zona plástica no modelo de Irwin
$2.r_p^*$	tamanho da zona plástica no modelo de Irwin
$r_p(\theta)$	extensões da zona plástica (tamanho) como função de θ
r_o	raio do núcleo da discordância
S	discordância em hélice
S^2	parâmetro da integral elíptica completa de 3 ^a classe
Si	silício
s	unidade de tempo, segundo
T	temperatura
T_c	temperatura de transição frágil-dúctil
T_m	temperatura de fusão medida na escala Kelvin
TiAl	liga intermetálica - 50 at.% de titânio e 50 at.% de alumínio
t	tempo
U	energia de mobilidade térmica de discordância
U_{BDT}	energia de ativação para a temperatura de transição frágil-dúctil
US\$	dólares
V	velocidade da discordância
$V(x,t)$	velocidade das discordâncias na posição x em um dado tempo t
W	tungstênio
W_F	energia da fratura
W_S	energia de superfície
X	posição da fonte de discordância
x_c	distância da ponta da trinca à fonte de discordância para os modos II e III
x_i e x_j	posições das i-ésima e j-ésima discordâncias para os modos II e III
Y	posição da fonte de discordância

y_c	distância da ponta da trinca à fonte de discordância para o modo I
y_i e y_j	posições das i -ésima e j -ésima discordâncias para o modo I
Z	ponto onde a fratura pode ser iniciada
ZnS	sulfeto de zinco
\perp	discordância em cunha

SÍMBOLOS GREGOS

α	parâmetro das integrais elípticas incompletas
α	parâmetro do expoente da tensão
α	variável x ou y dividida pelo tamanho da zona plástica
α_c	tamanho da DFZ dividida pelo tamanho da zona plástica
α_d	distância d_c dividida pelo tamanho da zona plástica
β	parâmetro do expoente da tensão
γ_p	trabalho plástico
γ_s	energia de superfície específica
δt	tempo, passo dos programas
$d\varepsilon/dt$	taxa de deformação aplicada
η	constante algébrica
θ	ângulo; 2ª coordenada polar
θ	ângulo entre a trinca e o plano de deslizamento
μ	módulo de cisalhamento
ν	coeficiente de Poisson
ξ	constante para os modos II e III
Π	energia potencial elástica da placa trincada
$\Pi(\pi/2, S^2, m)$	integral elíptica completa de 3ª classe
ρ	raio de curvatura

σ	tensão uniforme aplicada ao longo do eixo menor da elipse
σ	tensão total atuando sobre cada discordância nas simulações
σ	tensão ao longo da zona plástica
σ_A	tensão em um ponto A da cavidade elíptica
σ_F	tensão de fratura
σ_f	tensão de atrito
σ_{ij}	tensão total de cisalhamento
σ_{int}	tensão de interação
σ_{im}	tensão imagem
$\sigma_{(r)}$	tensão total no modelo de Chen & Kitaoka
$\sigma_{r\theta}$	tensões nas proximidades da trinca
σ_y	tensão
σ_{ys}	tensão de escoamento
σ_0	tensão aplicada
σ_1	1ª tensão principal
σ_2	2ª tensão principal
σ_3	3ª tensão principal
τ_{max}	tensão de cisalhamento máxima
ϕ	argumento das integrais elípticas incompletas

ABREVIATÓES

BDT	transição frágil-dúctil
CK	modelo de Chen & Kitaoka
CO	modelo de Chang & Ohr
CTOD	deslocamento de abertura da ponta da trinca
DFZ	zona livre de discordâncias

HRS	modelo de Hirsch et al
MB	modelo de Majumdar & Burns
MFEL	Mecânica da Fratura Elástica Linear
UFPR	Universidade Federal do Paraná
WWF	Organização Ambientalista - World Wildlife Fund

RESUMO

Vários modelos analíticos consideram as discordâncias que formam a zona plástica em torno da ponta da trinca como uma distribuição contínua infinitesimal de discordâncias em equilíbrio estático devido a uma tensão de atrito. Outros modelos consideram a evolução dinâmica da zona plástica com o tempo, e a descrição é baseada em simulações numéricas, onde a zona plástica é considerada ser formada por uma distribuição discreta de discordâncias fora do equilíbrio. Esta dinâmica é descrita por uma relação de potência entre velocidade, tensão total e temperatura. Neste trabalho, foram realizadas simulações numéricas considerando uma trinca infinita carregada sob uma taxa de carregamento fixa segundo o modelo de *Hirsch et al* (HRS). As discordâncias são emitidas por uma fonte de *Frank-Read* posicionada a uma distância fixa da ponta da trinca e em um plano que contém a frente da trinca. Das simulações, o tamanho da zona plástica, o tamanho da zona livre de discordâncias, o número total e a distribuição de discordâncias, a tensão ao longo da zona plástica e o fator de intensidade de tensão efetivo local foram calculados. Os resultados das simulações numéricas segundo os modelos de *Hirsch et al* (HRS) e de *Chen & Kitaoka* (CK) para o modo I de carregamento são comparados com as expressões dos modelos analíticos dinâmico deste trabalho (segundo o modelo CK), e estático de *Chen & Kitaoka* (CK) que possuem o termo de interação discordância-discordância numa forma mais simples em relação ao modelo de *Hirsch et al* (HRS). Para o modo III, as simulações de *Hirsch et al* (HRS) são comparadas com os modelos analíticos estáticos de *Chang & Ohr* (CO) e de *Majumdar & Burns* (MB) e com o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo HRS) que mostrou uma excelente concordância quando comparado com as simulações numéricas.

Palavras – chave: Trinca; Zona plástica; Discordâncias; Modelos analíticos.

ABSTRACT

Several analytical models consider the dislocations that form the plastic zone around an infinite crack loaded under a fixed loading rate as a continuous distribution of infinitesimal dislocations at static equilibrium due to a friction stress. Other models consider the dynamic evolution of the plastic zone with time and the description is based on computer simulations where the plastic zone is considered as formed by discrete dislocations in non-equilibrium. This dynamics is described by a power relation between velocity, total stress and temperature. In this work, numerical simulations were performed considering an infinite crack loaded under fixed loading rates according to *Hirsch et al* (HRS) model. The dislocations are emitted by a Frank-Read source positioned at a fixed distance ahead of the crack tip and in a plane containing the crack front. From the simulations, the plastic zone size, the dislocation free zone, the total number and the distribution of dislocations, the elastic stress and the effective stress intensity factor were calculated. The results from numerical simulations according to *Hirsch et al* (HRS) and *Chen & Kitaoka* (CK) models for mode I loading are compared with the dynamic analytic model of this work (according to HRS model) and to static *Chen & Kitaoka* (CK) model. For mode III, the *Hirsch et al* (HRS) simulations are compared with *Chang & Ohr* (CO) and *Majumdar & Burns* (MB) static analytic models, as the dynamic analytic model developed in this work (according to HRS model). The results show excellent agreement when compared with numerical simulations.

Keywords: Crack; Plastic zone; Dislocations; Analytical models.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A fratura consiste na separação ou fragmentação de um corpo sólido em duas ou mais partes, sob a ação de tensões aplicadas [1,2]. Devido à amplitude do tema, o estudo de fratura envolve diversas áreas, tais como a Física do Estado Sólido, a Ciência dos Materiais e a Mecânica do Meio Contínuo. Alguns avanços no estudo de fratura tem ajudado no controle do número de casos em que ocorreram falhas catastróficas, sendo que as principais causas são [3]:

1. Negligência na elaboração de projeto, construção ou operação estrutural;
2. Aplicação de um novo projeto ou material, produzindo resultados inesperados.

No tipo 1, alguns procedimentos de segurança e prevenção seriam suficientes para avaliar e até evitar uma falha – o erro humano. No tipo 2, que é mais difícil de prevenir, ensaios e análises do projeto e material podem minimizar a ocorrência de fraturas. Na literatura encontram-se vários exemplos de fraturas que ocorreram de maneira catastrófica, perigosa e que também proporcionaram muitos prejuízos materiais.

Navios da classe *Liberty*, da marinha dos Estados Unidos, na 2ª Guerra Mundial são casos famosos de fratura ocorrida por falhas do tipo 1 e 2 [4-6]. Em 1979, o Petroleiro *Kurdistan* fraturou em duas partes no Atlântico Norte, pela ação de tensões térmicas e devido ao casco ter sido inconvenientemente soldado [6]. Em 2002, o Petroleiro *Prestige* partiu-se em duas partes antes de afundar, conforme mostram as fotos da figura 1.1 [7]. Construído em 1976, o navio teve o seu casco trincado devido às fortes tempestades. Segundo o governo espanhol, o Petroleiro *Prestige*, de bandeira de Bahamas já havia derramado entre 5.000 e 6.000 toneladas de óleo quando o casco se rompeu, além de ter deixado um rastro de mais de 5.000 toneladas de óleo ao ser levado para alto-mar. O óleo atingiu a costa da Galícia (noroeste da Espanha), deixando cerca de mil pescadores sem condições de trabalho e cobrindo de negro os pássaros marinhos.

“Se todo o óleo do petroleiro vazar, será um desastre com o dobro do efeito do *Exxon Valdez*, que foi um dos piores que já vimos”, afirmou *Christopher Hails*, diretor da organização ambientalista *World Wildlife Fund (WWF)*, em referência à catástrofe ambiental provocada pelo vazamento de óleo na costa do Alasca em 1989. A *Exxon* teve de pagar US\$ 5 bilhões de indenização pelos danos causados no vazamento.



Figura 1.1 Fratura catastrófica ocorrida em 20/11/2002 no petroleiro *Prestige*, que levava 77 mil toneladas de óleo combustível e afundou cerca de 250 km da costa noroeste da Espanha [7].

Projetar estruturas visando a prevenção de falhas não é uma idéia nova, pois os Faraós do antigo Egito e os Imperadores Romanos encomendavam grandes obras que requeriam estruturas bem planejadas, as quais ainda hoje são prestigiadas e admiradas [6]. Isto se deve em grande parte à habilidade dos arquitetos e engenheiros da época, pois as velhas estruturas que permanecem erguidas até hoje, com certeza representam o sucesso destes projetistas e construtores.

Por volta de 1500, *Leonardo da Vinci* realizou experimentos em arames de ferro suspensos, que deram várias pistas sobre a origem da fratura. Ele concluiu qualitativamente que a força de tração variava inversamente com o comprimento do arame, e sendo assim, os arames mais longos proporcionavam um volume maior de amostra o que permitia uma maior probabilidade de provar que em uma certa região continha uma falha [6]. As causas da fratura de materiais ainda eram um mistério, tanto que *Love* publicou em 1892 no seu texto sobre elasticidade que “as condições em que ocorre uma ruptura são vagamente entendidas” [8].

Inglis em 1913 [3] e *Griffith* em 1920 [3,9] estabeleceram uma conexão entre a tensão de fratura e o tamanho da trinca. Esta teoria de fratura está baseada num simples equilíbrio de energia, de acordo com a 1ª lei da termodinâmica, e só é aplicada a sólidos

idealmente frágeis. *Irwin*, em 1948, fez uma modificação deste modelo para materiais metais dúcteis [3]. Ele percebeu que conceitos importantes já estavam disponíveis e realizou estudos para que a teoria de *Griffith* se adaptasse aos metais dúcteis. Também propôs o conceito do fator de intensidade de tensão, K .

Wells, em 1956, usou a teoria da mecânica da fratura para mostrar porque ocorriam fraturas na fuselagem de aeronaves. As trincas iniciavam-se nos cantos das janelas, onde foi verificado existir concentrações de tensões [6]. A *General Electric*, em 1957, também usou a teoria da Mecânica de Fratura para verificar as falhas nos rotores de turbinas a vapor [6]. Este conhecimento é atualmente aplicado na prevenção de fratura em rotores. Por volta de 1960, um limite histórico é marcado, pois existiam conceitos e fundamentos razoáveis para o estabelecimento da Mecânica da Fratura Elástica Linear (MFEL) e muitos pesquisadores chamaram a atenção para a plasticidade que ocorre na ponta da trinca [3]. Esta disciplina adota um tratamento inteiramente novo em relação ao fenômeno da fratura. Ela não se preocupa com a prevenção de nucleação das trincas. Ao contrário, admite-se que sempre haverá defeitos em um elemento estrutural e busca-se a resposta à pergunta: dada uma certa tensão, qual o maior tamanho de trinca que pode ser tolerado sem ocorrer à falha do componente? Sabendo-se a resposta, resta só usar técnicas de inspeção para selecionar o material que não possua defeitos maiores que o tamanho crítico para uma dada tensão projetada.

No início da década de 1960, várias pesquisas foram realizadas por *Dugdale*, *Barenblatt* e *Wells*, que elaboraram modelos baseados em pequenas falhas produzidas na ponta da trinca do material [6]. *Wells*, ao aplicar a MFEL em aços, percebeu que as faces da trinca moviam-se com o aumento da deformação plástica, o que conduziu à proposição do parâmetro conhecido por *CTOD*, o deslocamento de abertura da ponta da trinca [6].

Rice, em 1968, mostrou que a taxa de liberação de energia em uma deformação plástica (elástica não linear), poderia ser expressa através de uma integral de linha, a integral J [6]. *Shih*, em 1981, demonstrou uma relação entre os valores da integral J e do *CTOD*, parâmetros estes que atualmente são aplicados a muitos materiais [6]. Entre 1960 e 1980, foram desenvolvidas muitas pesquisas que trouxeram contribuições significativas para a teoria da Mecânica de Fratura. O objetivo geral deste trabalho é o de comparar modelos que descrevem a zona plástica ao redor da trinca. Os modelos

propostos são estáticos e dinâmicos. Os defeitos que distorcem a rede cristalina atuam como pontos que resistem ao escoamento plástico, aumentando a resistência mecânica do material. Existem fatores que são importantes para caracterizar o comportamento plástico dos materiais. Um destes fatores que deve ser levado em consideração é a temperatura. Certos materiais, como o *Si* e o *Ge*, apresentam em temperatura ambiente um comportamento frágil e somente apresentam plasticidade acima de determinada temperatura ($T \geq 400 \text{ } ^\circ\text{C}$), enquanto que cristais como o *NaCl* apresentam comportamento plástico já à temperatura ambiente [10].

A revisão bibliográfica dos assuntos de interesse desta dissertação será feita nos dois próximos capítulos. Os conceitos fundamentais da Mecânica da Fratura necessários para uma melhor compreensão do presente trabalho serão tratados no capítulo 2. Os conceitos que englobam este capítulo são: as discordâncias, a fratura, o fator de concentração de tensão, o balanço de energia de *Griffith*, a taxa de liberação de energia, os campos de tensão na ponta da trinca, os modos de fratura, interações entre trinca-discordâncias e a transição frágil-dúctil. No capítulo 3 será apresentada uma revisão dos modelos teóricos da transição frágil-dúctil de *Majumdar & Burns* de 1983, *Chang & Ohr* de 1981 e 1985, *Chen & Takezono* de 1995, *Chen & Kitaoka* de 1999, *Hirsch, Roberts & Samuels* de 1988, *Hirsch & Roberts* de 1989 e *Hartmaier & Gumbsch* de 1999. Por isso, este se torna extremamente importante para a compreensão dos capítulos subsequentes. Outros modelos também serão comentados sem maiores detalhes.

O objetivo geral desta dissertação é o de comparar modelos analíticos dinâmicos, que descrevem a zona plástica ao redor da ponta da trinca, desenvolvidos a partir de modelos analíticos estáticos e a sua confrontação com resultados obtidos através de simulações numéricas para diferentes modos de carregamento. Os modelos utilizados para fazer as comparações são de: *Hirsch et al* (modelo HRS), *Chen & Kitaoka* (modelo CK), *Majumdar & Burns* (modelo MB) e *Chang & Ohr* (modelo CO).

Desse modo, com base nos modelos existentes na literatura e discutidos no capítulo 3, foram traçados os objetivos específicos desta dissertação:

- Comparar qualitativamente e quantitativamente os modos I, II e III via simulação numérica;

- Verificar um modelo analítico dinâmico deste trabalho segundo o modelo HRS para os modos II e III, onde simples equações são obtidas para uma transição frágil-dúctil suave;
- Comparar entre si a simulação numérica segundo o modelo HRS, o modelo analítico estático e simulação numérica de CK e o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo CK), para o modo I;
- Comparar entre si a simulação numérica segundo o modelo HRS com os modelos analíticos estáticos de MB e CO e o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo HRS), para o modo III;
- Comparar entre si a simulação numérica segundo o modelo HRS com o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo HRS), para os modos II e III;
- Estudar a dinâmica de geração de discordâncias na ponta da trinca carregada em modo I, através de simulações numéricas (segundo o modelo HRS).

O capítulo 4 descreve o funcionamento do algoritmo do programa [11] escrito em linguagem *Fortran 77* utilizado nas simulações numéricas. Este está baseado no modelo HRS. A partir de dados gerados das simulações numéricas, a dinâmica da zona plástica ao redor da ponta da trinca é estudada para diferentes modos de carregamento. Dois modelos analíticos dinâmicos foram desenvolvidos no capítulo 5. O primeiro para os modos II e III, segundo o modelo HRS e o segundo para o modo I, segundo o modelo CK. Nestes dois modelos analíticos, simples equações são obtidas como resultado para uma transição frágil-dúctil suave.

O capítulo 6 confronta os modelos analíticos entre si desenvolvidos no capítulo 5, e os modelos analíticos apresentados no capítulo 3, com as simulações numéricas discutidas no capítulo 4. A simulação numérica se torna uma ferramenta importante para tal comparação. Finalmente, no capítulo 7, as conclusões sobre o estudo realizado são relacionadas e algumas sugestões para trabalhos futuros são apresentadas.

CAPÍTULO 2

MECÂNICA DA FRATURA: CONCEITOS FUNDAMENTAIS

Este capítulo tem como objetivo fornecer elementos para uma melhor compreensão dos demais capítulos subseqüentes. Para tal finalidade, os principais conceitos básicos relevantes ao trabalho serão abordados.

2.1. TEORIA ELEMENTAR DE DISCORDÂNCIAS

2.1.1 Discordâncias em cunha e em hélice

Discordâncias são defeitos de linha presentes na maioria dos materiais e são uns dos responsáveis pela diferença existente entre os valores da resistência mecânica teórica e real dos metais. A escala ou faixa dimensional típica das discordâncias está compreendida no intervalo entre 10^{-9} a 10^{-5} m [3].

Estes defeitos cristalinos foram postulados em 1934, independentemente, por *Polanyi, Orowan & Taylor*, que propuseram um tipo de discordância que veio a ser chamado de discordância em cunha. Em 1939, *J. M. Burgers* propôs um outro tipo, a discordância em hélice [3,12-16].

Considere o cubo perfeito da figura 2.1. Conforme a direção do corte que é feito e o cisalhamento que se aplica ao cubo, obtêm-se dois tipos de discordância. A linha de imperfeições AA (a extremidade do corte) é chamada de linha da discordância. Se os átomos são deslocados perpendicularmente à linha de discordância, tem-se uma discordância em cunha (figura 2.1 (a)). Caso forem deslocados paralelamente à linha, tem-se uma discordância em hélice (figura 2.1 (b)).

Estes defeitos permitem, através de seus movimentos, que um cristal seja deformado plasticamente (cisalhado) sem que haja o movimento relativo simultâneo de

todos os átomos. Assim, mesmo que a energia liberada para a deformação seja a mesma com o cisalhamento simultâneo ou o movimento da discordância, a força aplicada é muito inferior para este último caso.

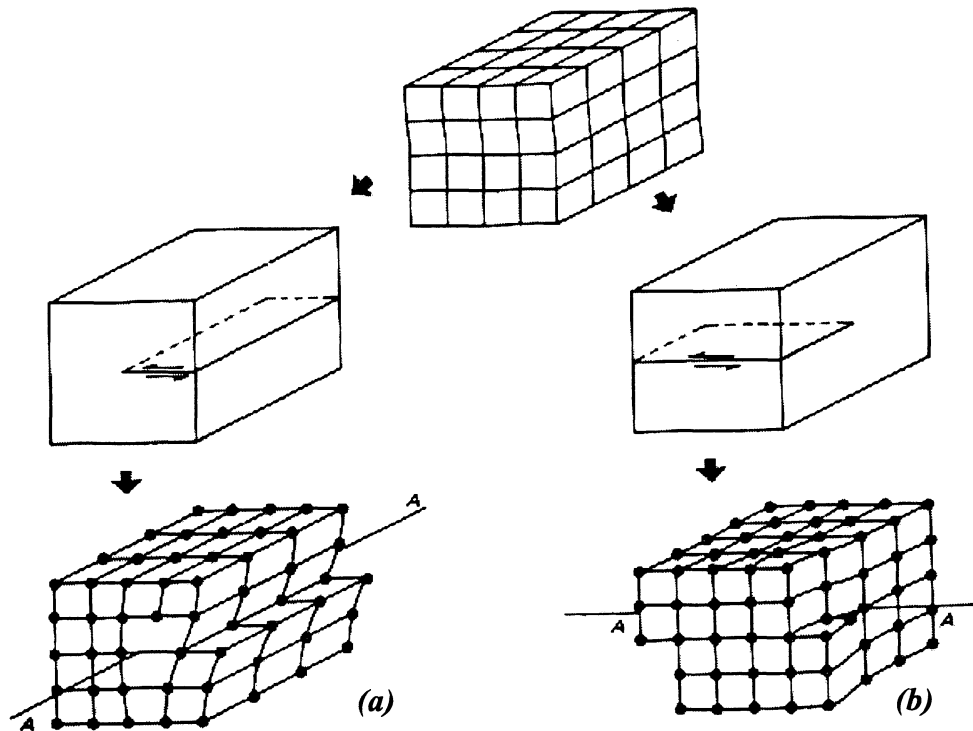


Figura 2.1 – Discordância em cunha e em hélice obtidas a partir de um cristal perfeito [3].

2.1.2 Fonte de discordâncias: o mecanismo de Frank-Read

Observa-se experimentalmente que a deformação plástica aumenta a densidade de discordâncias em um cristal. Este fato é aparentemente paradoxal, pois presumia-se, em uma primeira análise, que as discordâncias existentes se moveriam até ser eventualmente ejetadas do material [3]. Em 1950, *Frank & Read* encontraram uma solução para o problema ao proporem um mecanismo para a multiplicação de discordâncias.

A figura 2.2 representa esquematicamente a formação de um laço de discordância na seqüência (a), (b), (c), (d) e (e). Em (a), a linha de discordância DD' em um plano de deslizamento, que está representado pelo plano da página. Em (b), uma tensão de cisalhamento é aplicada sobre o plano de deslizamento, a qual produzirá uma tensão sobre a linha de discordância. Em (c), a tensão sobre a linha é aumentada

fazendo com que o raio de curvatura da linha de discordância DD' diminua até seu valor mínimo. Neste ponto, ou seja, em (d) , a tensão é máxima e a linha de discordância DD' alcança uma condição de instabilidade. Quando m se aproxima-se de n , os segmentos de discordâncias tem sinais opostos e, portanto, se atraem. O laço de discordância é formado em (e) , e o processo se inicia novamente, sendo que a tensão necessária para ativar a fonte de *Frank-Read* é a necessária para transformar a linha de discordância ou segmento DD' em um semi-círculo.

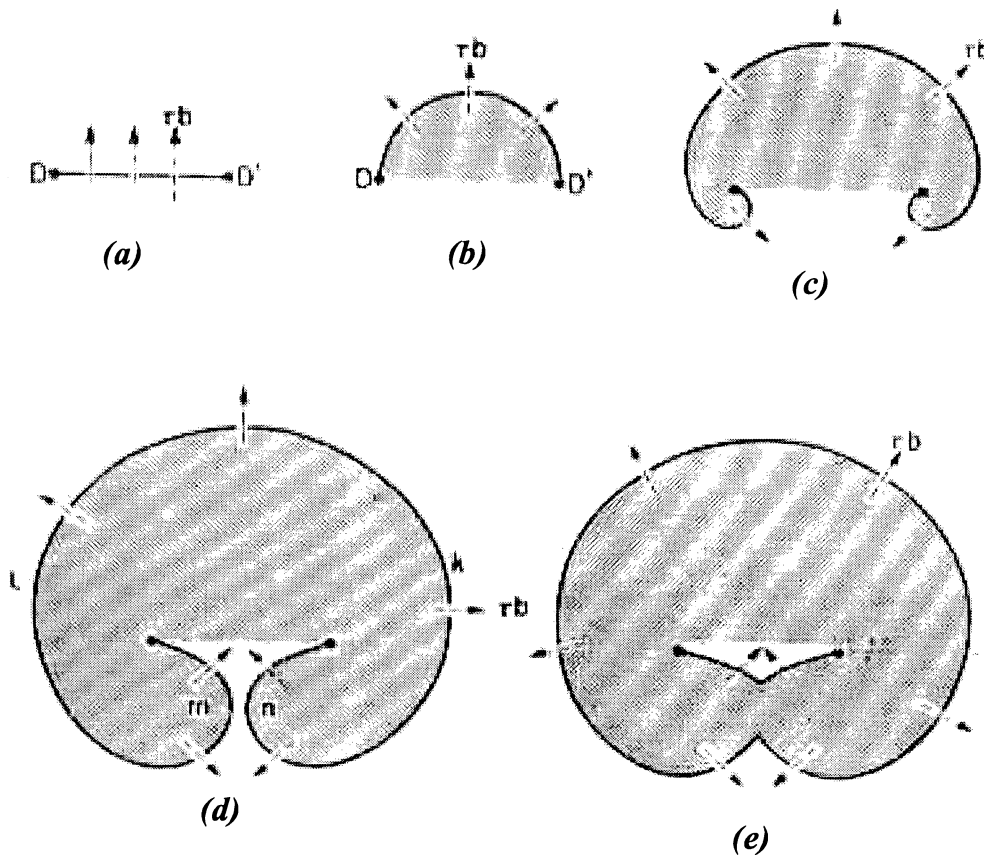


Figura 2.2 – Diagrama representativo do movimento das discordâncias em laço formadas pelo mecanismo de Frank-Read [14].

2.1.3 Tensão imagem

Quando uma discordância se move em um cristal e chega à superfície, ela deixa de existir. Sua energia de linha desaparece e o cristal se coloca em situação termodinamicamente mais estável. Havendo esse gradiente de energia, é lógico supor-se que a discordância seja atraída pela superfície livre [3]. As figuras 2.3 (a) e (b) mostram, respectivamente, as discordâncias-imagem em hélice e em cunha.

Em (a), S é o símbolo da discordância em hélice, enquanto que em (b), \perp é o da discordância em cunha. Em ambas as figuras 2.3, d é a distância da discordância a superfície livre.

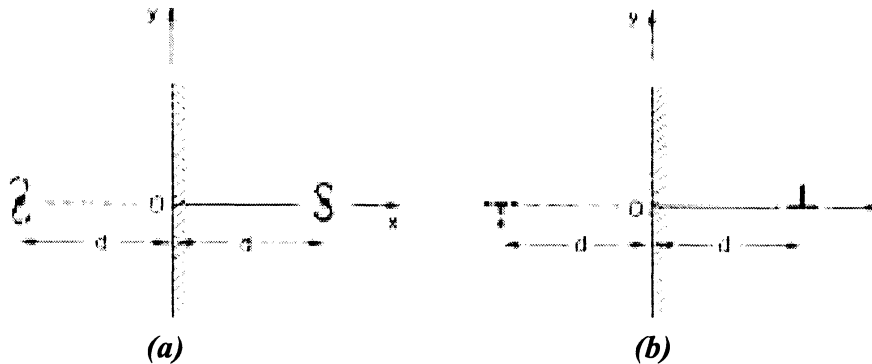


Figura 2.3 – Discordâncias em hélice em (a), e em cunha em (b) a uma distância d da superfície $x = 0$. A discordância imagem está em uma distância d da superfície [14].

A tensão imagem σ_{im} que atrai as discordâncias em hélice e em cunha à superfície, para o caso em que a linha de discordância é infinita, retilínea e paralela à superfície, é dada por [3,14]:

$$\sigma_{im} = -\frac{\mu b}{4\pi\xi.d}, \quad (2.1)$$

onde b é o vetor de *Burgers*, μ é o módulo de cisalhamento, d é a distância da discordância a superfície, $\xi = 1$ para discordância em hélice, $\xi = (1 - \nu)$ para discordância em cunha e ν é o coeficiente de *Poisson*.

2.1.3 Tensão de interação

As fontes de *Frank-Read* produzem muitas discordâncias em um mesmo plano de deslizamento. Suponha que várias discordâncias estejam presentes em um plano de deslizamento, de forma que um empilhamento seja formado. As discordâncias geram um campo de tensão entre elas, de forma que a tensão de interação σ_{int} entre discordância-discordância sem a presença de trinca e considerado as linhas de discordâncias como infinitas e paralelas entre si, seja dada por [13]:

$$\sigma_{\text{int}} = \frac{\mu b}{2\pi\xi} \sum_{j \neq i} \frac{1}{x_i - x_j}, \quad (2.2)$$

onde x_i e x_j são, respectivamente, as i -ésima e j -ésima posições das discordâncias.

2.2. FRATURA

O fenômeno da fratura pode ser definido como o processo de separação ou fragmentação de um corpo sólido em duas ou mais partes sob a ação de tensões, podendo ter características frágeis, semi-frágeis ou dúcteis [1-3]. O processo de fratura, em todos os casos, pode ser considerado em termos dos seguintes estágios [3]:

1. Acúmulo de dano;
2. Iniciação de uma ou mais trincas no material;
3. Propagação de trinca, levando à fratura.

2.2.1 Fratura Frágil

A fratura frágil ocorre de uma maneira catastrófica pelo rompimento de ligações interatômicas, ao longo de planos cristalográficos específicos. Os materiais amorfos, como exemplo o vidro comercial alcalino, também apresentam comportamento frágil [2]. Este é o caso para os materiais com estruturas do tipo diamante, ZnS , silicatos, alumina, mica, B , W , carbetos e nitretos [3,11]. Os materiais não apresentam deformações plásticas significativas, ou seja, em um material frágil, as discordâncias são praticamente imóveis. A tendência de um material fraturar-se de uma maneira frágil é maior com o aumento da taxa de deformação ou a ocorrência da deformação em baixas temperaturas. Isto é observado na fratura dos aços a baixas temperaturas [3].

2.2.2 Fratura Semi-Frágil

A fratura semi-frágil ocorre tanto pelo rompimento de ligações interatômicas como também pela mobilidade de discordâncias, mas o número de planos de deslizamento é restrito. Há uma tendência para que ocorra uma pequena plasticidade inicial e a fratura subsequente ocorre em planos cristalográficos bem definidos. Este é o caso para os materiais com estruturas do tipo $NaCl$, cristais iônicos, metais hexagonais

densamente empacotados (titânio, zinco, magnésio e zircônio), a maioria dos metais cúbicos de corpo centrado (ferro, tungstênio, nióbio) e polímeros vítreos [3,11].

2.2.3 Fratura Dúctil

A fratura dúctil ocorre quando o material se deforma plasticamente, afetado pela mobilidade de discordâncias, sendo este o principal fator que leva o material à fratura. Devido a grande facilidade da ocorrência de deformação plástica, não existe qualquer restrição ao movimento das discordâncias e assim elas podem mover-se em um número elevado de sistemas de deslizamento e ocorre a intersecção de diversos planos de deslizamento. Este é o caso dos metais cúbicos de face centrada (níquel, cobre, alumínio, ouro, chumbo, platina, prata), polímeros não-vítreos e alguns metais cúbicos de corpo centrado (vanádio) [3,11]. A energia envolvida neste processo é bem mais elevada do que na fratura frágil, pois o material absorve uma grande quantidade de energia durante a deformação plástica.

2.3. FATOR DE CONCENTRAÇÃO DE TENSÃO

Em 1913, *C. E. Inglis* usou a teoria da elasticidade para analisar o campo de tensão em uma cavidade elíptica numa placa tensionada uniformemente. A principal conclusão tirada deste trabalho é que a tensão na ponta de um entalhe é várias vezes maior do que a tensão aplicada na placa. Considere a situação ilustrada na figura 2.4, em que uma placa contém uma cavidade elíptica sujeita a uma tensão uniforme aplicada σ ao longo do eixo menor da elipse. A tensão σ_A em um ponto A na ponta da cavidade elíptica é máxima e é dada pela relação [3]:

$$\sigma_A = \sigma \left(1 + 2 \frac{a}{b} \right), \quad (2.3)$$

em que σ_A é a tensão na ponta da trinca da cavidade elíptica, σ é a tensão aplicada na placa, a e b são os semi-eixos maior e menor da elipse respectivamente.

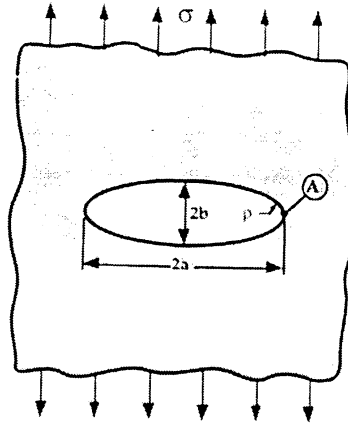


Figura 2.4 - Cavidade central elíptica em uma placa tensionada [6].

Para o caso de uma elipse bem achatada ou de uma trinca estreita de comprimento $2a$, tendo um raio de curvatura $\rho = b^2/a$, a equação 2.3 é aproximada de acordo com a expressão [3,6]:

$$\sigma_A = \sigma \left(1 + 2\sqrt{\frac{a}{\rho}} \right). \quad (2.4)$$

Para um pequeno raio de curvatura, existe maior concentração de tensão e no limite de $\rho \rightarrow 0$, $\sigma_A \rightarrow \infty$. O termo $2\sqrt{a/\rho}$ é definido como o fator de concentração de tensão K_t . Pela equação 2.4, nota-se que este fator depende tanto da forma da cavidade como do seu tamanho, e também descreve o efeito da geometria da trinca sobre a tensão local. O valor de K_t é aumentado com o aumento do comprimento da trinca e com o decréscimo no raio de curvatura na ponta da trinca.

2.4. BALANÇO DE ENERGIA DE GRIFFITH

Em 1920, *Alan A. Griffith* [9] usou a Primeira Lei da Termodinâmica para analisar teoricamente o fenômeno de fratura, baseando-se no ponto de vista da energia total do sistema. Quando um sistema passa de um estado de não-equilíbrio para um estado de equilíbrio, a energia total do sistema é reduzida.

Considere uma placa, de espessura B , sujeita a uma tensão uniforme σ , que contém uma trinca de comprimento $2a$ como mostra a figura 2.5. O balanço energético entre a energia elástica armazenada e a energia de superfície necessária para criar as

novas superfícies da trinca resulta em, para o caso de estado de tensão plana, que a tensão de fratura, σ_F , é dada por [3,6]:

$$\sigma_F = \sqrt{\frac{2E\gamma_s}{\pi a}}, \quad (2.5)$$

onde E é o módulo de elasticidade, γ_s é a energia de superfície específica e a é a metade do comprimento da trinca. A expressão anterior descreve a tensão necessária para a propagação da trinca (fratura) e é válida somente para materiais idealmente frágeis.

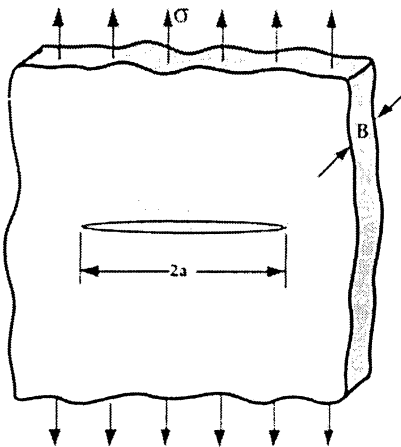


Figura 2.5 – Trinca em uma placa infinita sujeita a uma tensão de tração remota [6].

Irwin e *Orowan*, independentemente, modificaram a equação 2.5 de *Griffith* para o caso de materiais que se deformam plasticamente na ponta da trinca. Devido à alta concentração de tensão, além do trabalho elástico realizado para a produção de duas superfícies de fratura, uma certa quantidade de trabalho plástico é realizada durante a extensão da trinca. Esta equação modificada, para o caso de tensão plana, é dada por [3,6]:

$$\sigma_F = \sqrt{\frac{2E(\gamma_s + \gamma_p)}{\pi a}}, \quad (2.6)$$

onde γ_p é o trabalho plástico e é tipicamente muito maior que γ_s . A deformação plástica localizada na ponta da trinca relaxa as tensões, em decorrência do aumento do raio de curvatura na ponta da trinca.

2.5. TAXA DE LIBERAÇÃO DE ENERGIA

Em meados da década de 1950, *George R. Irwin* definiu a taxa de liberação de energia, G . Esta é uma medida da energia disponível para um incremento de extensão da trinca, e dada pela equação [3,6]:

$$G = -\frac{d\Pi}{dA}, \quad (2.7)$$

ou seja, G é a variação da taxa de energia potencial elástica com a área da trinca, Π é a energia potencial elástica da placa trincada e A é a área da trinca. Portanto, como é obtido da derivada de um potencial, também é chamada de força para a extensão da trinca.

A taxa de liberação de energia para uma placa tensionada com uma trinca de comprimento $2a$ (figura 2.5) é [3,6]:

$$G = \frac{\pi\sigma^2 a}{E}. \quad (2.8)$$

De uma maneira análoga e equivalente ao modelo de *Griffith, Irwin* propôs, para o caso de estado de tensão plana, que a fratura ocorre em uma tensão de fratura σ_F que corresponde a um valor crítico da força para a extensão da trinca, e a equação 2.6 é modificada como [3,6]:

$$\sigma_F = \sqrt{\frac{EG}{\pi a}}. \quad (2.9)$$

A propagação da trinca num sólido ocorre quando G alcança um valor crítico, isto é [3,6]:

$$G_C = \frac{dW_S}{dA} = 2w_F, \quad (2.10)$$

onde W_S é a energia de superfície e w_F é a energia da fratura. A derivada da equação 2.10 é uma medida da tenacidade à fratura do material, a qual é uma resistência à propagação instável da trinca.

2.6. CAMPO DE TENSÃO ELÁSTICO NA PONTA DA TRINCA E OS MODOS DE CARREGAMENTO

Para configurações com trincas sujeitas a forças externas, *Westergaard*, *Irwin*, *Sneddon* e *Williams* estão entre os primeiros pesquisadores a publicarem expressões para as tensões num corpo elástico linear, isotrópico e trincado [6]. A figura 2.6 define um sistema de coordenadas polares com a origem na ponta da trinca. Uma trinca é definida como uma superfície livre, interna e plana num campo de tensão elástico linear [3].

Com esta hipótese e com base na Mecânica da Fratura Elástica Linear, as tensões $\sigma_{r\theta}$ nas proximidades da trinca são dadas por [3,6,17,18]:

$$\sigma_{r\theta} = \left(\frac{K_i}{\sqrt{2\pi r}} \right) f_i(\theta), \quad (2.11)$$

onde r e θ são as coordenadas polares definidas na figura 2.6, $f_i(\theta)$ é uma função angular que depende da direção e do modo de carregamento envolvido. A grandeza K_i é o fator de intensidade de tensão e o subscrito i denota o modo de carregamento. A figura 2.7 apresenta os três modos básicos de carregamento que podem ser aplicados numa trinca.

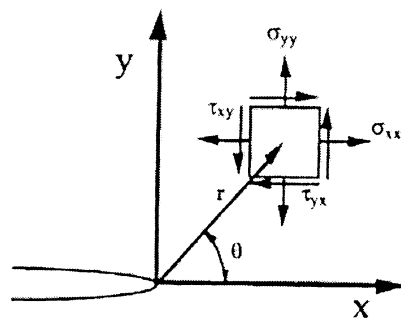


Figura 2.6 – Definição do eixo de coordenada na ponta da trinca. A direção z é normal à página [6].

O modo I (figura 2.7a) é chamado de modo de abertura. A tensão de tração é normal às faces da trinca. O modo II (figura 2.7b) é chamado de modo de deslizamento ou cisalhamento dianteiro. A tensão de cisalhamento é normal à aresta que avança. No

modo III (figura 2.7c) é chamado de modo de rasgamento ou cisalhamento transversal e neste caso, a tensão de cisalhamento é paralela à aresta que avança.

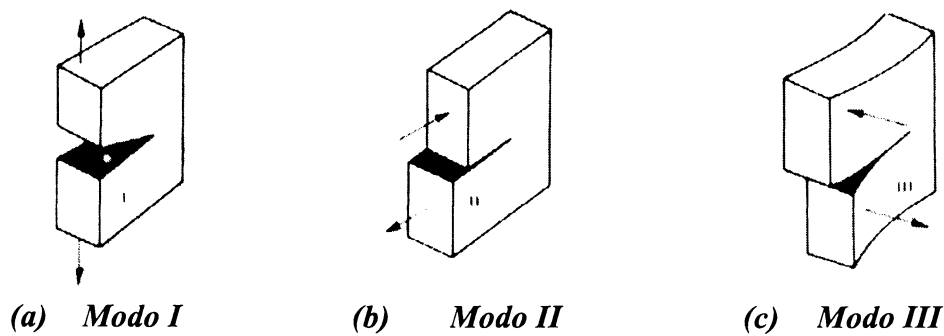


Figura 2.7 – Os três modos de carregamento que podem ser aplicados a uma trinca [3].

2.7. INTERAÇÕES: TRINCA - DISCORDÂNCIAS

Todos materiais frágeis exibem uma transição frágil–dúctil em uma temperatura de $\sim 2/3 T_m$, onde T_m é a temperatura de fusão medida na escala Kelvin [11]. Neste valor de temperatura, interações podem ocorrer entre a trinca e as discordâncias e em consequência disso, o fator de intensidade de tensão na ponta da trinca é alterado. Essas duas interações são o embotamento e a blindagem.

2.7.1 Embotamento

O embotamento é uma maneira pelo qual uma trinca é afetada pela emissão de discordâncias. A figura 2.8 mostra o arranjo atômico de uma estrutura cristalina cúbica simples que contém uma trinca. Quando uma discordância em cunha representada pelo símbolo \perp é emitida pela ponta da trinca, a largura da trinca é aumentada por um espaçamento atômico. Em consequência disso, o raio de curvatura da ponta da trinca é aumentado.

Como mostrado por *C. E. Inglis* em 1913 [11], se o raio de curvatura da trinca for aumentado, implicará num decréscimo no fator de concentração de tensão na ponta da trinca.

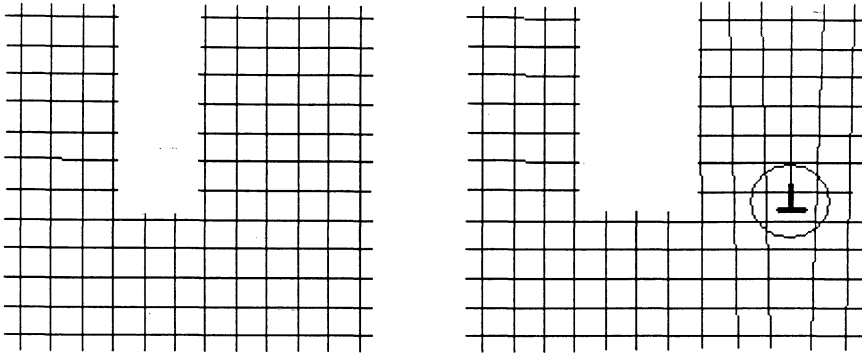


Figura 2.8 – Ponta da trinca embotada pela emissão de uma discordância em cunha [11,19].

Como apontado por *Rice & Thomson* [19], em 1974, se o embotamento ocorre, o aumento no raio de curvatura ocorre na ordem de um espaçamento atômico. Com isso, a probabilidade da trinca encontrar uma fonte de discordância externa na posição correta e numa distância suficiente para operar é pequena. Além disso, a condição de que o plano de deslizamento intercepte toda a frente da trinca deve ser satisfeita.

2.7.2 Blindagem

A blindagem é uma outra maneira pelo qual uma trinca pode interagir com discordâncias. Isto ocorre devido à interação do campo de tensão da discordância com o campo de tensão na frente trinca, que pode aumentar ou diminuir o fator de intensidade de tensão na ponta da trinca.

Pelo tratamento matemático da blindagem na ponta da trinca desenvolvido por *Lin & Thomson* em 1986, a magnitude da blindagem K_{si} é dada por [20]:

$$K_{si} = \sum_j K_{ij}^D(\theta) \frac{\mu b_j}{\sqrt{2\pi r}}, \quad (2.12)$$

onde o índice i refere-se aos três modos de carregamento, μ é o módulo de cisalhamento, b_j são as componentes do vetor de Burgers, r é a distância entre a discordância e a ponta da trinca, $K_{ij}^D(\theta)$ é uma função angular e θ é o ângulo entre a trinca e o plano de deslizamento.

A magnitude do efeito da blindagem depende do sinal do vetor de Burgers. Se o vetor de *Burgers* da discordância em cunha for positivo, com símbolo \perp , o sistema

encontra-se na condição de blindagem e o fator de intensidade de tensão efetivo local será reduzido.

Caso o vetor de *Burgers* da discordância for negativo, o contrário ocorre e o sistema encontra-se na condição de antiblindagem e o fator de intensidade de tensão efetivo local será aumentado. Para discordância em hélice, o símbolo usado é *S*, e a mesma abordagem é válida para o efeito da blindagem.

2.8. ZONA PLÁSTICA NA PONTA DA TRINCA

2.8.1 Correção de Irwin para a zona plástica

As soluções para o campo de tensão elástico (equação 2.11) exibem singularidade para as tensões na ponta de uma trinca elástica, isto é, as tensões $\sigma_{r\theta}$ tendem ao infinito quando r tende a zero. Na prática, para a maioria dos materiais (especialmente os metais), o escoamento ocorrerá localmente na ponta da trinca, para que as tensões sejam relaxadas. Mas então, onde ocorre deformação plástica, a singularidade nas tensões deixa de existir. Quando o escoamento ocorre na ponta da trinca, ela torna-se embotada, isto é, as superfícies da trinca separam-se sem extensão na trinca.

A figura 2.9 mostra a magnitude da tensão σ_y em um plano $\theta = 0$. Até a distância r_p^* da ponta da trinca, a tensão é elevada e igual a tensão de escoamento σ_{ys} [21].

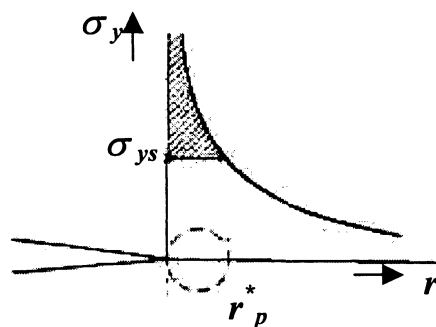


Figura 2.9 – Correção para a zona plástica (segundo Irwin) [21].

Irwin, por volta de 1958, fez uma correção para o tamanho da zona plástica de tal forma que o raio da zona plástica r_p^* na ponta da trinca, para os casos de tensão e deformação plana, são dados respectivamente por [3,21]:

$$r_p^* \approx \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_I}{\sigma_{ys}} \right)^2, \quad (2.13)$$

$$r_p^* \approx \frac{1}{6\pi} \left(\frac{K_I}{\sigma_{ys}} \right)^2, \quad (2.14)$$

onde K_I é o fator de intensidade de tensão aplicado em modo I e σ_{ys} é a tensão de escoamento. De fato, o tamanho da zona plástica é igual a $2r_p^*$, devido às redistribuições das tensões na vizinhança da zona plástica.

A substituição de c por $(c + r_p^*)$ nas equações do campo de tensão elástico daria um ajustamento adequado para a plasticidade na ponta da trinca para as condições de escoamento em pequena escala. Com esse ajustamento, o fator de intensidade de tensão aplicado K , é útil para a caracterização da condição de fratura. Mas se, a tensão aplicada é bem grande e a zona plástica aumenta em tamanho em relação ao comprimento da trinca, as equações do campo de tensão elástico perdem precisão e K deixa de ter sentido como parâmetro do campo de tensão.

2.8.2 Aproximação de Dugdale para a zona plástica

Dugdale, por volta de 1960, também propôs um modelo para a zona plástica na ponta da trinca para o caso de tensão plana. Nesse, admitiu-se que as regiões de plasticidade tomam a forma de duas tiras estreitas estendendo-se a uma distância R , a partir de cada extremidade da trinca, conforme mostra a figura 2.10.

Para uma análise matemática, admite-se que a trinca interna de comprimento $2c$ estende-se elasticamente para um comprimento igual a $2a$, mas uma tensão interna é aplicada na região $c < x < a$ para fechar a trinca. Pode-se mostrar que essa tensão interna deve ser igual à tensão de escoamento do material, σ_{ys} , de modo que $c < x < a$ representa regiões de plasticidade.

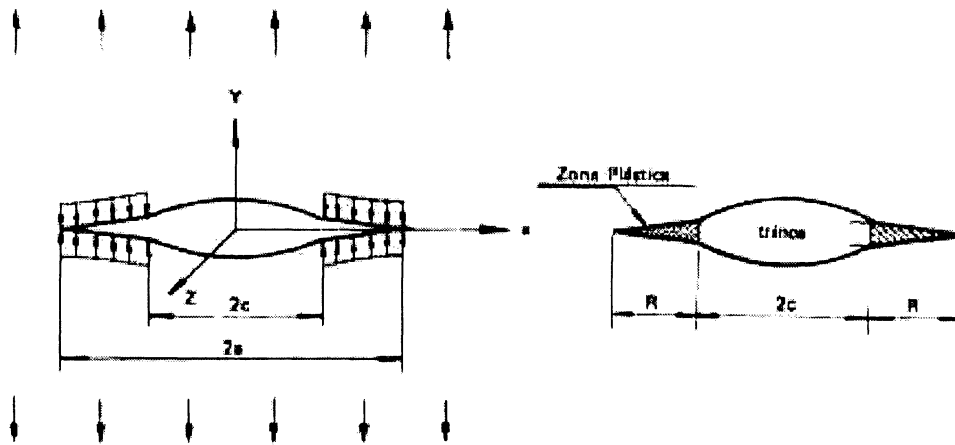


Figura 2.10 – Aproximação para a zona plástica (segundo Dugdale) [3].

Combinando o campo de tensão interna nas regiões plásticas com o campo de tensão externo associado à tensão aplicada, *Dugdale* mostrou que o tamanho da zona plástica é dado por [3,21]:

$$R \approx \frac{\pi}{8} \left(\frac{K_I}{\sigma_{ys}} \right)^2. \quad (2.15)$$

Comparando os modelos de *Irwin* e *Dugdale*, vê-se que há boa concordância entre os dois, pois $\frac{1}{\pi} \approx \frac{\pi}{8}$.

2.8.3 A forma da zona plástica

A extensão da zona plástica ao longo do eixo x tem sido considerada somente ao longo da direção x , e também foi assumido que a zona plástica possui a forma circular. Porém, a forma da zona plástica pode ser obtida verificando-se as condições de escoamento para ângulos diferentes de zero. Para tal fim, os critérios de *Tresca* e *Von Mises* são aplicados.

No critério de *Tresca*, o escoamento ocorre quando a tensão de cisalhamento máxima, τ_{\max} , atinge um valor igual à tensão de escoamento em cisalhamento, σ_{ys} , para o caso de tração (ou compressão) uniaxial. Este critério é representado pela expressão dada por [3,21]:

$$\tau_{\max} = \frac{\sigma_{ys}}{2}. \quad (2.16)$$

Já segundo o critério de *Von Mises*, que é expresso em termos das tensões principais σ_1 , σ_2 e σ_3 , haverá escoamento quando [21]:

$$(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2 = 2\sigma_{ys}^2. \quad (2.17)$$

As equações para o campo de tensão, para o modo I, em termos das tensões principais, são dadas por [21]:

$$\sigma_1 = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \right), \quad (2.18)$$

$$\sigma_2 = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \right), \quad (2.19)$$

$$\sigma_3 = \nu(\sigma_1 + \sigma_2). \quad (2.20)$$

A fronteira da zona plástica como função de θ , segundo o critério de *Von Mises*, é obtida substituindo as equações 2.19 a 2.21 em 2.18, e obtêm-se respectivamente, para os estados de deformação e tensão plana, as expressões [21]:

$$\frac{K^2}{2\pi r} \left[\frac{3}{2} \operatorname{sen}^2 \theta + (1 - 2\nu)^2 (1 + \cos \theta) \right] = 2\sigma_{ys}^2, \quad (2.21)$$

$$\frac{K^2}{2\pi r} \left(1 + \frac{3}{2} \operatorname{sen}^2 \theta + \cos \theta \right) = 2\sigma_{ys}^2. \quad (2.22)$$

As extensões da zona plástica (tamanhos) como função de θ , segundo o critério de *Von Mises*, respectivamente para o caso de deformação e tensão plana, são dadas por [21]:

$$r_p(\theta) = \frac{K^2}{4\pi\sigma_{ys}^2} \left[\frac{3}{2} \operatorname{sen}^2 \theta + (1 - 2\nu)^2 (1 + \cos \theta) \right], \quad (2.23)$$

$$r_p(\theta) = \frac{K^2}{4\pi\sigma_{ys}^2} \left(1 + \frac{3}{2} \text{sen}^2 \theta + \cos \theta \right). \quad (2.24)$$

A extensão da zona plástica (tamanho) como função de θ , segundo o critério de *Tresca*, respectivamente para o caso de tensão e deformação plana, são dadas por [21]:

$$r_p(\theta) = \frac{K^2}{2\pi\sigma_{ys}^2} \left[\cos \frac{\theta}{2} \left(1 + \text{sen} \frac{\theta}{2} \right) \right]^2, \quad (2.25)$$

$$r_p(\theta) = \frac{K^2}{2\pi\sigma_{ys}^2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \left[1 - 2\nu + \text{sen} \frac{\theta}{2} \right]^2. \quad (2.26)$$

A figura 2.11 mostra as formas da zona plástica segundo o critério de *Von Mises* (equações 2.23 e 2.24) em (a), e em (b) segundo o critério de *Tresca* (equações 2.25 e 2.26), para $\nu = \frac{1}{3}$. O tamanho da zona plástica no estado de deformação plana é apreciavelmente menor que no caso de tensão plana. Para o caso em que $\theta = 0$ e $\nu = \frac{1}{3}$, a diferença é de um fator igual a 9.

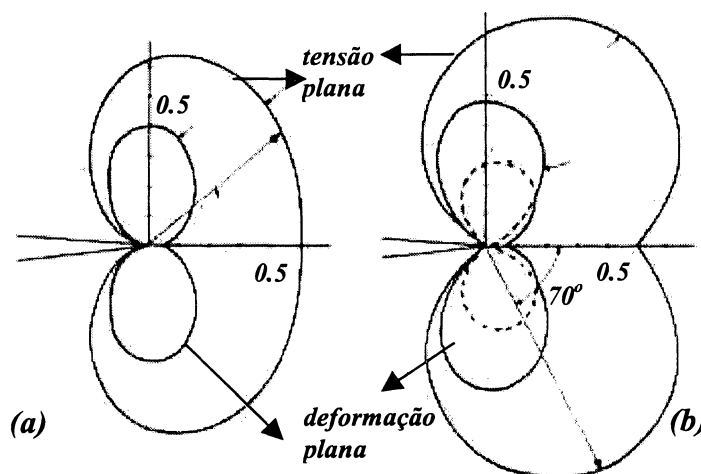


Figura 2.11 – Formas da zona plástica, para o modo I, em (a) segundo o critério de *Von Mises* e em (b) segundo o critério de *Tresca* [21].

Uma análise similar pode ser feita para os modos II e III. As formas das zonas plásticas baseadas no critério de escoamento de *Von Mises*, para esses modos de carregamento, são mostradas na figura 2.12.

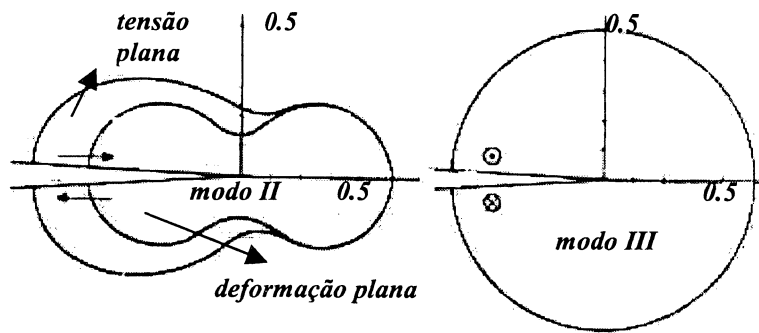


Figura 2.12 – Formas da zona plástica, para os modos II e III, segundo o critério de escoamento de Von Mises [21].

2.9. TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL

A transição frágil-dúctil é caracterizada por uma mudança na resistência à fratura de um determinado material em estudo. Uma grande quantidade de sólidos cristalinos falham por clivagem em baixa temperatura e por processos plásticos em alta temperatura [22]. A clivagem ocorre por uma separação direta ao longo dos planos cristalográficos específicos por um simples arrancamento de ligações atômicas [3].

Os desempenhos dos materiais nas aplicações estruturais são freqüentemente limitados por uma transição de fratura dúctil para fratura frágil, em resposta ao decréscimo da temperatura. A transição é caracterizada pelo decréscimo gradual da tensão de fratura sobre uma região de temperatura da ordem de 100 K ou mais. Os metais de estrutura cúbica de corpo centrado, ligas intermetálicas [23], MgO [24] e Ge [25] apresentam esse tipo de transição frágil-dúctil suave.

Em monocristais de Si e Al_2O_3 , a transição é abrupta [25], ocorrendo sobre um intervalo de temperatura menor que 10 K. A figura 2.13 mostra uma transição frágil-dúctil de maneira abrupta no silício, por meio de um gráfico da tensão, σ em função da temperatura, T . O ponto *A* em $535\text{ }^{\circ}\text{C}$, mostra o limite elástico por parte do material e também indica um comportamento frágil. O ponto *B* em $541\text{ }^{\circ}\text{C}$ indica um comportamento em que ocorre a transição. Já o ponto *C* em $545\text{ }^{\circ}\text{C}$, mostra o início da deformação plástica, e indica um comportamento dúctil.

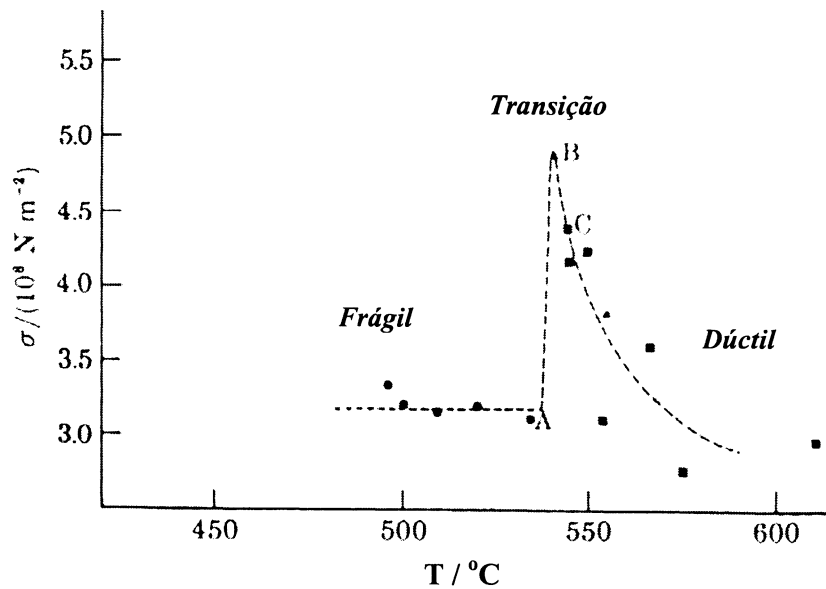


Figura 2.13 – A tensão σ em função da temperatura T , mostra a transição frágil-dúctil de maneira abrupta do silício. O símbolo representado por um círculo indica um comportamento frágil por parte do material, o quadrado indica um comportamento dúctil e o triângulo indica a região de transição [11,26-28].

A figura 2.14 apresenta o gráfico do logaritmo da taxa de carregamento, \dot{K} em função do inverso da temperatura crítica, T_C da transição frágil-dúctil. A partir deste gráfico, obtido para diferentes experimentos da transição frágil-dúctil em silício, a energia de ativação pode ser obtida através de ajuste numérico da inclinação da reta. Como um exemplo de resultados experimentais disponíveis na literatura, a tenacidade à fratura de monocristais de tungstênio é apresentada na figura 2.15 como função da temperatura e da taxa de carregamento. Os símbolos cheios representam um comportamento frágil por parte do material, enquanto que os vazios representam um comportamento dúctil. O principal resultado é uma forte dependência da temperatura de transição frágil-dúctil e da tenacidade à fratura em função da taxa de carregamento. Em baixas temperaturas, esta dependência desaparece.

Vários experimentos realizados em amostras pré-trincadas de diversos materiais tais como Ge [11, 25], Mo [29], TiAl [30], NiAl [11,31] e W [32-34] mostraram que a tenacidade à fratura eleva-se gradualmente com a temperatura e a temperatura de transição frágil-dúctil depende da taxa de deformação aplicada.

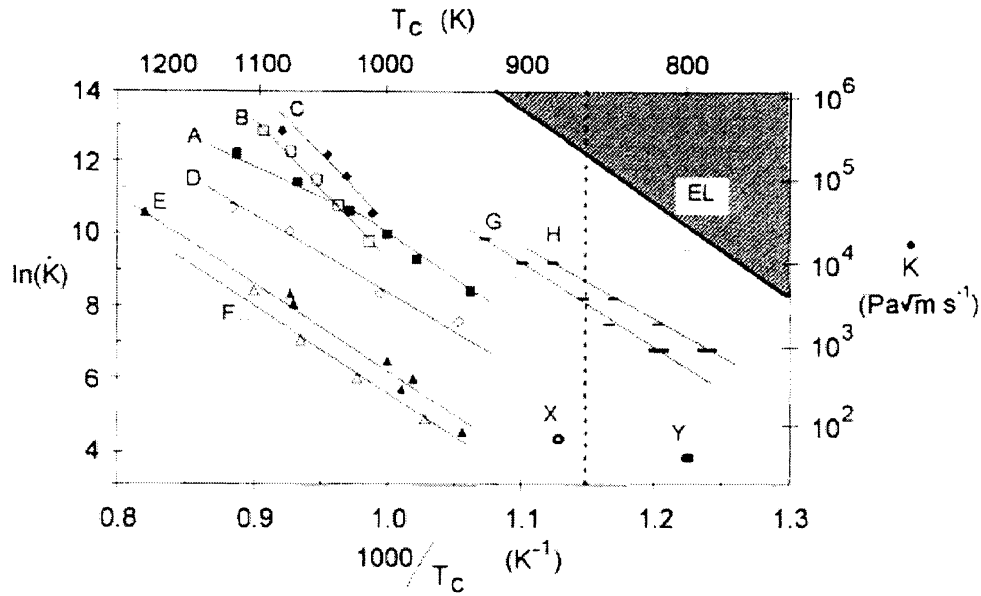


Figura 2.14 – Logaritmo neperiano da taxa de carregamento em função do inverso da temperatura crítica da transição frágil-dúctil para diferentes experimentos em silício [28]. A-C Brede & Haasen (1989); D St John (1975); E-F Michot & George (1986, 1993); G-H Samuels & Roberts (1989).

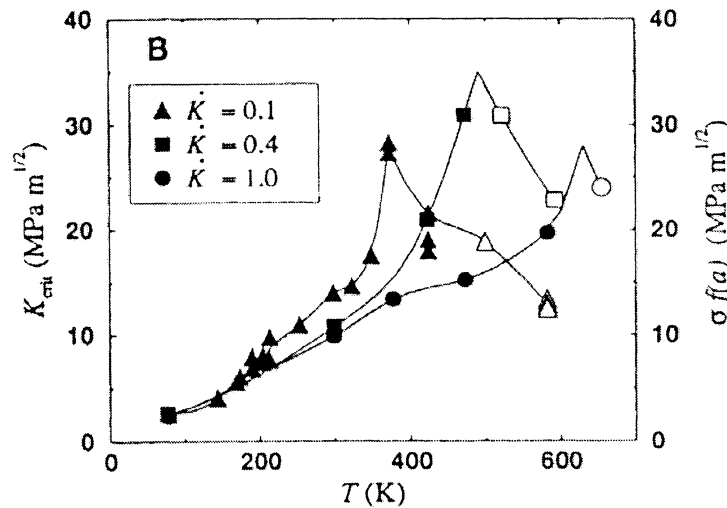


Figura 2.15 – Tenacidade à fratura K_{crit} de monocristais de tungstênio pré-trincados como função da temperatura T para diferentes taxas de carregamentos dK/dt ($MPa \cdot m^{1/2} \cdot s^{-1}$) [33,34].

O aumento na tenacidade à fratura com a temperatura está relacionado com o aumento na mobilidade de discordâncias resultando em um acréscimo na deformação plástica em torno da trinca. A zona plástica é formada reduzindo o fator de intensidade de tensão na ponta da trinca através da interação elástica entre trinca-discordância.

Os experimentos em si demonstram que [26-28,35-38]:

- i. Abaixo da temperatura de transição frágil-dúctil T_C , o material exibe um comportamento frágil com um valor de tenacidade à fratura constante e igual a K_{IC} e sem ativação de discordâncias em torno da ponta da trinca;
- ii. A transição é abrupta, de modo que em temperaturas igual à T_C ou acima, uma zona plástica é formada, com uma avalanche de discordâncias sendo emitidas da ponta da trinca em T_C ;
- iii. A temperatura de transição é dependente da taxa de deformação aplicada $\dot{\varepsilon}$, de tal forma que envolve uma energia de ativação para a temperatura de transição frágil-dúctil U_{BDT} :

$$\dot{\varepsilon} = C \exp\left(\frac{-U_{BDT}}{kT_C}\right), \quad (2.27)$$

onde C é uma constante. Os valores da energia de ativação encontrados são os mesmos que a energia térmica para a mobilidade de discordâncias.

- iv. A temperatura de transição frágil-dúctil é sensível à geometria e a composição química das amostras. A geometria está relacionada com a orientação da trinca e a composição química como os efeitos de dopagem e impurezas.
- v. Para materiais onde a tenacidade à fratura aumenta gradativamente com a temperatura, embora a fratura ainda seja frágil, é observada a atividade de discordâncias ao redor da ponta da trinca em temperaturas bem abaixo de T_C . Neste caso, a transição é chamada de transição suave. É verificado que T_C depende da taxa de deformação aplicada na mesma forma do que expressa em iii.

CAPÍTULO 3

MODELOS DA TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL

Neste capítulo, é feita uma revisão bibliográfica dos principais modelos da transição frágil-dúctil, necessária para a compreensão do presente trabalho.

Para tal finalidade, os modelos teóricos de *Majumdar & Burns* [39], *Chang & Ohr* [40-42], *Chen & Takezono* [43], *Chen & Kitaoka* [44], *Hirsch, Roberts & Samuels* [45] e *Hirsch & Roberts* [46] serão abordados em detalhes. Outros modelos também serão descritos.

3.1. MODELOS QUE CONSIDERAM A PROPAGAÇÃO DA TRINCA

Os modelos teóricos de *Ashby & Embury* [47] e *Argon* [11] foram propostos para a transição frágil-dúctil em termos da interação entre o movimento da trinca por clivagem e discordâncias. Nestes modelos, as discordâncias presentes no material interagem com o campo elástico da trinca quando esta se propaga. Dependendo de condições tais, como a densidade inicial de discordâncias, temperatura e mobilidade de discordâncias, ocorrerá ou não a sua multiplicação em número suficiente para dissipar energia e embotar a ponta da trinca, determinando assim se a fratura será frágil ou dúctil.

3.2. MODELOS QUE CONSIDERAM A TRINCA ESTÁTICA

3.2.1 Emissão de discordâncias pela ponta da trinca

Nos modelos de *Kelly, Tyson & Cottrell* [48], *Rice & Thomson* [19], *Khantha, Pope & Vitek* [49] e *Xu, Argon & Ortiz* [50,51] são considerados que as discordâncias são emitidas pela ponta da trinca.

O equilíbrio entre as forças atuando sobre o laço (*loop*) de discordâncias determinadas pelo campo elástico da trinca, a tensão superficial causada pela criação de superfícies na trinca embotada e a força imagem determinam uma barreira de energia a ser vencida para a emissão do laço e um raio crítico r_c a partir da qual o laço é estável. É assumido que se o raio do núcleo (*core*) r_0 da discordância é maior do que, r_c , a emissão é espontânea e o material é dúctil. Quanto menor é o raio do núcleo em relação à r_c , maior será a barreira de energia e mais frágil será o material [19].

3.2.2 Interação da zona plástica com a trinca – modelo estático

Os modelos descritos nesta seção consideram que as discordâncias que formam a zona plástica estão sempre em repouso, e sob equilíbrio devido à existência de uma tensão de atrito. Nestes casos, equações de equilíbrio são obtidas de modo que permitem achar soluções analíticas para os diferentes modelos propostos.

O modelo analítico desenvolvido por *Bilby, Cottrell & Swinden* em 1963, apresentou uma grande contribuição, sendo o primeiro a descrever a trinca em termos de discordâncias [52]. Neste modelo, a trinca e suas zonas plásticas são representadas por uma distribuição contínua de discordâncias.

A zona plástica é unidimensional e contida no plano da trinca. Este problema na teoria de distribuição contínua de discordâncias é solucionado através da resolução de uma equação integral singular. O resultado requer que a tensão de cisalhamento em qualquer discordância na distribuição seja igual a zero, e isto ocorre quando o sistema está em equilíbrio, sob a ação de uma tensão de atrito. Nesse modelo, as discordâncias dentro da zona plástica formam um empilhamento invertido e a densidade de discordâncias tende ao infinito na ponta da trinca. Isto ocorre porque esta região possui elevados valores de tensão, fazendo com que um grande número de discordâncias estejam presentes nesta região. O tamanho da zona plástica e o deslocamento de abertura da ponta da trinca, mais conhecido por *CTOD*, são similares aos resultados obtidos por *Dugdale* em 1960 para a mecânica do meio contínuo [53]. Uma das limitações deste modelo é que ele não considera uma zona livre de discordâncias, a chamada *DFZ*, entre a trinca e a zona plástica. Dentro da *DFZ*, o material tem um comportamento elástico.

Considerando uma distribuição contínua infinitesimal de discordâncias em hélice ao longo de um plano paralelo ao plano da trinca, *Majumdar & Burns* [39], em 1983, desenvolveram um modelo analítico para uma trinca de *Griffith* blindada por um empilhamento de discordâncias sob o modo III de carregamento. Nesse trabalho, *Majumdar & Burns* mostraram que dado o fator intensificador de tensão externo, a tensão de atrito e o fator de intensidade de tensão para o material, então o tamanho da zona plástica, o tamanho da zona livre de discordâncias e a distribuição de discordâncias podem ser encontrados. O balanço da força total na discordância em uma dada posição no plano de deslizamento, devido a um certo número de discordâncias discretas em equilíbrio no empilhamento, é zero. O deslocamento total da rede de discordâncias é nb , onde n é o número de discordâncias e b é o vetor de *Burgers*, e a zona plástica é tratada como uma distribuição contínua de discordâncias. Para o equilíbrio de todas as discordâncias, a seguinte equação integral singular deve ser satisfeita [39]:

$$\int_e^a \sqrt{\frac{x'}{x}} \frac{1}{(x'-x)} f(x') dx' = \sqrt{\frac{2\pi}{x}} \frac{K_{III}}{\mu b} - \frac{2\pi\sigma_f}{\mu b}, \quad (3.1)$$

onde σ_f é a tensão de atrito, μ é o módulo de cisalhamento, K_{III} é o fator de intensidade de tensão aplicada, $f(x')$ é a função de distribuição de discordâncias, e é o tamanho da zona livre de discordâncias e a é o tamanho da zona plástica. O lado esquerdo da equação 3.1 representa a interação entre as discordâncias, enquanto que o 1º termo do lado direito representa o campo de tensão aplicado na trinca em modo III e o 2º termo representa a parte que contém a tensão de atrito para o equilíbrio do sistema. O termo da tensão imagem é desprezado neste modelo.

Através da resolução de uma equação integral de *Cauchy*, que está definida em termos de seus valores principais, *Majumdar & Burns* usaram o método de *Muskhelishvili* [54] que impõe uma condição apropriada para resolver a equação integral singular. Após várias manipulações algébricas, a função distribuição de discordâncias $f(x)$ é obtida e dada por [39]:

$$f(x) = \frac{4\sigma_f}{\pi\mu b} \left[F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) E(\phi, k) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) F(\phi, k) \right], \quad (3.2)$$

onde $F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ e $E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ são as integrais elípticas completas de primeira e segunda classe respectivamente, $F(\phi, k)$ e $E(\phi, k)$ são as integrais elípticas incompletas de primeira e segunda classe respectivamente, $\phi = \text{sen}^{-1}\left(\frac{1}{\alpha}\right)$ é o argumento das integrais elípticas incompletas, $\alpha = k\sqrt{\frac{x}{x-e}}$ é um parâmetro e $k = \sqrt{1 - \frac{e}{a}}$ é o módulo das integrais elípticas.

A partir da função distribuição de discordâncias (equação 3.2), a blindagem na ponta da trinca e o número de discordâncias podem ser obtidos respectivamente pelas expressões [39]:

$$K_S = -\int_e^a \frac{\mu b}{\sqrt{2\pi x}} f(x) dx = -2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{1-k^2}} \cdot \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} - 1 \right] \sigma_f \sqrt{e}, \quad (3.3)$$

$$n = \int_e^a f(x) dx = \frac{4\sigma_f e}{\pi \mu b} \cdot F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot \left[\frac{E^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{1}{1-k^2} - 1 \right], \quad (3.4)$$

onde K_S é o fator de intensidade de tensão que blindar a ponta da trinca e n é o número de discordâncias dentro da zona plástica.

Weertman, Lin & Thomson [55], em 1983, desenvolveram expressões analíticas para uma distribuição contínua de discordâncias na ponta de uma trinca de *Griffith* submetida a carregamentos em modo II ou modo III. Em ambos os lados da trinca, a uma certa distância w , existem dois planos de deslizamento que são paralelos ao plano da trinca. É assumido que o deslizamento pode ocorrer somente em um desses dois planos e a força por unidade de comprimento é uma função complexa.

A matemática usada para passar da distribuição discreta para uma distribuição contínua linear de discordâncias, é feita por meio da integral J . A partir desta, equações analíticas podem ser obtidas para descrever o sistema trinca-discordância, e estas expressões são análogas às obtidas por *Majumdar & Burns* [39].

Observações experimentais por microscopia eletrônica de transmissão da distribuição de discordância em vários metais (aço inoxidável, cobre, níquel, alumínio, molibdênio, nióbio e tungstênio), realizadas por *Ohr* [42], em 1985, mostraram que entre a trinca e a zona plástica existe uma região elástica livre de discordâncias. Estes experimentos representam a primeira confirmação experimental da teoria de *Bilby, Cottrell & Swinden* [52] da fratura em metais, mas também demonstram uma das falhas da teoria, que não inclui a zona livre de discordâncias.

Ohr elaborou um modelo analítico incluindo a zona livre de discordâncias, para uma trinca elasto-plástica carregada em modo III, por meio de uma tensão aplicada σ_a , e com uma distribuição de discordâncias em hélice e sob equilíbrio de uma tensão de atrito [42]. Se a trinca estiver carregada em modo II, tem-se uma distribuição de discordâncias em cunha e a formulação matemática difere apenas de um fator constante. A figura 3.1 mostra de maneira esquemática uma trinca finita representada por uma rede de discordâncias em cunha, a zona livre de discordância e as zonas plásticas que são constituídas por distribuições contínuas de discordâncias em cunha, além da forma da curva de função de distribuição.

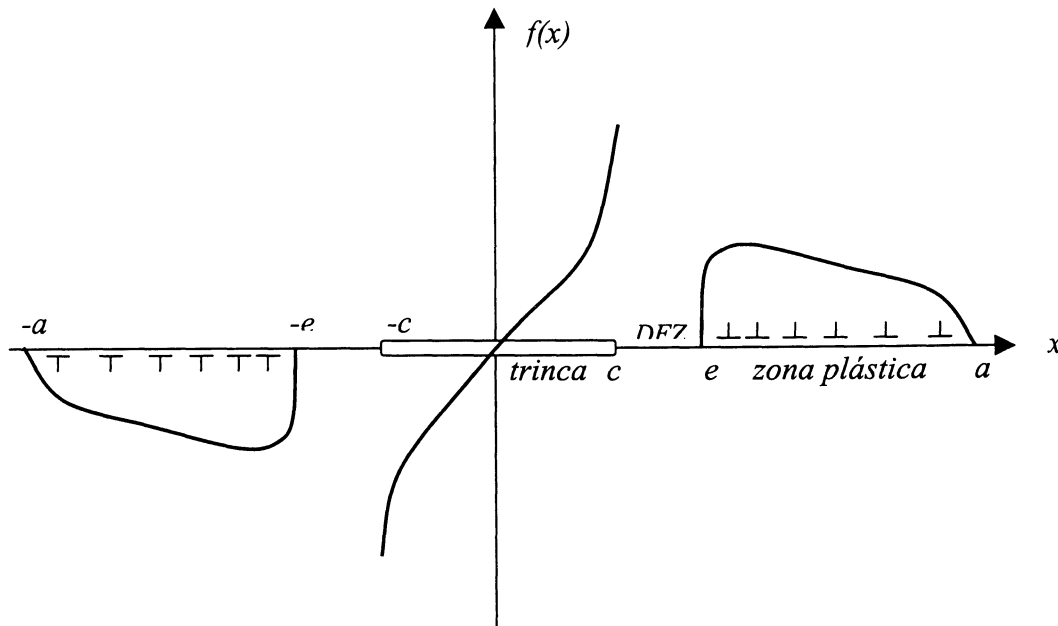


Figura 3.1 – Modelo de Chang & Ohr para uma trinca elasto-plástica que inclui a zona livre de discordâncias DFZ. As zonas plásticas são formadas por distribuições contínuas de discordâncias em cunha para a trinca carregada em modo II.

A função distribuição $f(x)$ para uma rede de discordâncias em um plano de deslizamento coplanar em equilíbrio com a trinca deve satisfazer a seguinte equação integral singular [42]:

$$\frac{\mu b}{2\pi} \left(\int_{-a}^{-e} + \int_{-c}^c + \int_e^a \right) \frac{f(x')}{x-x'} dx' + \sigma_a = 0, \quad (3.5)$$

para $x < c$ e

$$\frac{\mu b}{2\pi} \left(\int_{-a}^{-e} + \int_{-c}^c + \int_e^a \right) \frac{f(x')}{x-x'} dx' + \sigma_a = \sigma_f, \quad (3.6)$$

para $-a < x < -e$ e $e < x < a$.

As equações 3.5 e 3.6 podem ser resolvidas pelo método de *Muskhelishvili* e a solução pode ser escrita na forma analítica, como segue [42]:

$$f(x) = \frac{4\sigma_f}{\pi\mu b} F\left(\frac{\pi}{2}, m\right) \left\{ \frac{Q(m^2 - Q^2)^{1/2}}{(1 - Q^2)^{1/2}} - \left(E(D, m) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, m\right) F(D, m)}{F\left(\frac{\pi}{2}, m\right)} \right) \right\}, \quad (3.7)$$

onde $F\left(\frac{\pi}{2}, m\right)$ e $E\left(\frac{\pi}{2}, m\right)$ são as integrais elípticas completas de primeira e segunda classe respectivamente, $F(D, m)$ e $E(D, m)$ são as integrais elípticas incompletas de primeira e segunda classe respectivamente, $D = \text{sen}^{-1}\left(\frac{Q}{m}\right)$ é o argumento das integrais

elípticas incompletas, $Q(x) = \sqrt{\frac{(a^2 - x^2)c^2}{(a^2 - c^2)x^2}}$ é um parâmetro, $m = Q(e)$ é o módulo das integrais elípticas, e é o tamanho da zona livre de discordâncias, a é o tamanho da zona plástica, c é o tamanho da trinca e x é uma variável do sistema.

A solução apresentada na equação 3.7 necessita que a seguinte condição seja satisfeita, para que $f(e) = f(a) = 0$ [42]:

$$\frac{\pi\sigma_a}{2\sigma} = \frac{e^2 - c^2}{e(a^2 - c^2)^{1/2}} \Pi\left(\frac{\pi}{2}, S^2, m\right) \quad (3.8)$$

onde σ_a é a tensão aplicada, $\Pi\left(\frac{\pi}{2}, S^2, m\right)$ é a integral elíptica completa de terceira classe e $S^2 = \frac{(a^2 - e^2)}{(a^2 - c^2)}$ é um parâmetro da integral elíptica. Esta equação é análoga à condição da teoria de *Bilby, Cottrell & Swinden* [52], e também se refere à condição do tamanho da zona livre de discordâncias (*DFZ*).

O fator de intensidade de tensão efetivo local K_e , devido ao efeito da blindagem de discordâncias emitidas pela ponta da trinca, no modelo de *Chang & Ohr*, é dado por [40]:

$$\frac{K_e}{\sigma_f \sqrt{c}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{(e-c)^{1/2}}{e} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, m\right), \quad (3.9)$$

onde as variáveis já foram definidas anteriormente. O número de discordâncias é obtido através da integração da função distribuição de discordâncias dada pela equação 3.7.

Usando o campo de tensão em torno da ponta de uma trinca semi-infinita sob o modo I de carregamento, *Lakshmanan & Li* [56], em 1988, trataram numericamente a presença de uma zona livre de discordâncias entre a trinca e a zona plástica. Para isso, foi considerado que as discordâncias em cunha emitidas pela ponta da trinca num plano de deslizamento orientado em um certo ângulo do plano da trinca estão em posições de equilíbrio. Neste trabalho, o efeito da tensão aplicada, o ângulo de inclinação do plano de deslizamento, a tensão de atrito para o movimento das discordâncias e o número de discordâncias na zona plástica foram investigados.

O equilíbrio da distribuição de discordâncias em cunha emitidas da trinca em modo I ao longo de um único plano inclinado ou dois planos inclinados orientados simetricamente mostra uma zona livre de discordâncias próximo à ponta da trinca, se o plano de deslizamento não está saturado com discordâncias. Esta zona livre de discordâncias, a chamada *DFZ*, desaparece com a saturação do plano de deslizamento. A *DFZ* decresce em tamanho com o acréscimo no número de discordâncias emitidas da

trinca, enquanto que a zona plástica aumenta de tamanho. Para o mesmo número de discordâncias, a zona plástica é máxima para o plano inclinado em um ângulo de $70,53^\circ$. A *DFZ* decresce em tamanho com o acréscimo do atrito da rede para com o movimento de discordâncias e cresce em tamanho com o acréscimo do fator de intensidade de tensão aplicada.

O problema da trinca infinita carregada em modo I, com a descrição do campo de tensão elástico nas proximidades da ponta da trinca e incluindo a possibilidade de uma zona livre de discordâncias foi estudado através do modelo analítico desenvolvido, em 1999, por *Chen & Kitaoka* [44].

Como pesquisado por *Chen & Takezono* [43], em 1995, para uma trinca em modo I, em um espécime de alumínio, quando a carga externa é aplicada, discordâncias são geradas e emitidas da ponta da trinca. As discordâncias emitidas deslizam para fora da trinca e aproximam-se do restante no plano inclinado para formar uma zona plástica de tamanho igual a a , e também, deixam atrás uma zona livre de discordâncias de tamanho igual a e . As discordâncias estão em equilíbrio sob a ação de uma tensão de atrito. Uma vez emitidas, as discordâncias interagem elasticamente com a trinca, modificando o campo de tensão e o fator intensidade de tensão local. Um estado proposto de equilíbrio de discordâncias é mostrado na figura 3.2 [44]. As siglas nesta figura são: c é a metade do tamanho da trinca, e é o tamanho da zona livre de discordâncias, *DFZ* é a zona livre de discordâncias, a é o tamanho da zona plástica, θ é o ângulo que o plano inclinado faz com a trinca e r é a distância radial.

O sistema de coordenadas polares foi usado para descrever a região do empilhamento de discordâncias, $e < r < a$ e a zona livre de discordâncias, $0 < r < e$.

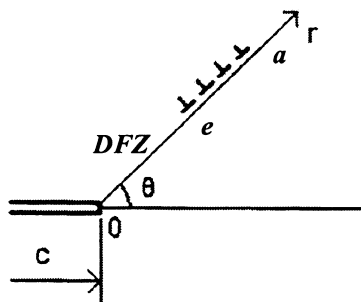


Figura 3.2 – Configuração do empilhamento de discordâncias próximo a ponta da trinca em um plano inclinado [44].

Este problema envolve um caso de deformação plana, e a equação de equilíbrio para a tensão total de cada discordância discreta é composta da soma de quatro termos [44]: a tensão na trinca devido ao carregamento em modo I, a tensão de interação entre todas as discordâncias, a tensão imagem e a tensão de atrito ao movimento das discordâncias.

Supondo que uma distribuição infinitesimal de discordâncias $f(x)$ existe na região $e < x < a$, como resultado da equação de equilíbrio para o sistema, uma equação integral para uma distribuição contínua de discordâncias foi obtida, e é dada por [44]:

$$\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_e^a \frac{f(x)}{r-x} dx = \sigma(r), \quad (3.10)$$

onde μ é o módulo de cisalhamento, b é o vetor de *Burgers*, ν é o coeficiente de *Poisson* e $\sigma(r)$ é a tensão total do sistema. Uma segunda equação subsequente é dada por [44]:

$$\sigma(r) = \sigma_f - \frac{K_I \sin \theta \cos \frac{1}{2} \theta}{2\sqrt{2\pi r}}, \quad (3.11)$$

onde σ_f é a tensão de atrito, r e θ são as coordenadas polares definidas na figura 3.2 e o termo da direita desta equação é o campo elástico da trinca. Neste modelo, a tensão imagem foi negligenciada. A expressão 3.10 é uma equação integral singular para $f(r)$, no qual a zona plástica é limitada em e e a . Para isto ocorrer, a condição abaixo necessita ser satisfeita, para que $f(e) = f(a) = 0$ [44]:

$$\int_e^a \frac{\sigma(x) dx}{\sqrt{(x-e)(a-x)}} = 0. \quad (3.12)$$

Uma segunda condição subsidiária, também deve ser satisfeita [44]:

$$\int_e^a \frac{x\sigma(x) dx}{\sqrt{(x-e)(a-x)}} = \frac{\mu}{2(1-\nu)} \times b_T, \quad (3.13)$$

onde b_T é o vetor de *Burgers* total. Sob essas duas condições dadas pelas equações 3.12 e 3.13, a solução para a equação integral é dada por [44]:

$$f(r) = \frac{2(1-\nu)\sigma_f}{\mu b} \sqrt{\frac{a}{r}} \left[E(\phi, k) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} F(\phi, k) \right], \quad (3.14)$$

onde $\phi = \arcsen \sqrt{\frac{(a-x)}{(a-e)}}$ é o argumento das integrais elípticas incompletas, $k = \sqrt{1 - \frac{e}{a}}$

é o módulo das integrais elípticas, e os demais termos foram definidos no modelo de *Majumdar & Burns*. A condição da DFZ, equação 3.12, é reduzida para [44]:

$$\pi\sigma_f - \frac{K_e \sen \theta \cos \frac{1}{2}\theta}{\sqrt{2\pi a}} \times F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = 0. \quad (3.15)$$

Esta expressão estabelece uma relação entre o fator intensidade de tensão efetivo local K_e , o tamanho da zona livre de discordâncias e , o tamanho da zona plástica a e o módulo k da integral elíptica.

O número de discordâncias é dado pela integração da função de distribuição de discordâncias, no intervalo de $e < x < a$, e é dado pela expressão[44]:

$$n = \frac{2\pi a(1-\nu)\sigma_f}{\mu b} \left[\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right]. \quad (3.16)$$

As discordâncias emitidas pela trinca e empilhadas no plano inclinado modificam os campos de tensões na ponta da trinca, e produzem um efeito de blindagem.

3.2.3 Interação da zona plástica com a trinca – modelo dinâmico

Nestes modelos, as discordâncias que formam a zona plástica não estão em equilíbrio. A tensão total atuando sobre cada uma das discordâncias não é nula, fazendo com que a zona plástica aumente continuamente com tempo. Nestes casos, não existem modelos analíticos e o fenômeno é tratado através de simulação numérica onde as discordâncias são discretas.

Com base nos experimentos da transição frágil-dúctil discutidos no capítulo 2, *Hirsch, Roberts & Samuels* [26], em 1987, realizaram experimentos e desenvolveram um modelo teórico para a transição frágil-dúctil e a blindagem de discordâncias na ponta da trinca em modo III. Em 1989, *Hirsch, Roberts & Samuels* [26,45] realizaram experimentos e desenvolveram um modelo análogo, mas para a trinca carregada em modo I. Estes dois modelos serão discutidos e comentados abaixo.

Os modelos assumem que discordâncias em forma de laços são geradas e emitidas por duas fontes *Frank-Read* posicionadas em X e Y na frente da trinca em $K = K_N$, sob os modos III ou I conforme mostra o modelo representado na figura 3.3. As duas fontes de discordâncias são necessárias para explicar o fenômeno da transição frágil-dúctil abrupta do Si. Nas simulações numéricas que serão discutidas no capítulo 4, somente uma fonte de discordância foi utilizada. No modo III, discordâncias em hélice representadas por “S” são emitidas em um plano coplanar com o plano da trinca, enquanto que em modo I, discordâncias em cunha representadas por “⊥” são emitidas em um plano perpendicular com o plano da trinca. As discordâncias emitidas, tanto as em hélice com as em cunha, movem-se para fora da ponta da trinca, e isto ocorre quando $K > K_N$.

A mobilidade de discordâncias é descrita segundo uma lei de *Arrhenius* [11], ou seja $V = A\sigma^m \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$, onde V é a velocidade da discordância, σ é a tensão total atuando sobre cada discordância, T é a temperatura, A e m são constantes e U é a energia de mobilidade térmica de discordância. A tensão total sobre cada discordância é a soma da tensão elástica da trinca, da tensão imagem e da tensão total resultante da interação com as outras discordâncias que formam a zona plástica, na presença da trinca.

Como visto no capítulo 2, interações ocorrem entre a trinca e as discordâncias (embotamento e blindagem) emitidas pelas fontes. O ponto Z , entre as duas fontes X e Y , é um lugar onde a fratura pode ser iniciada a qualquer momento. Porém este mesmo ponto é blindado pelas discordâncias emitidas das fontes e que tenham se movido a uma distância maior do que d_c , conforme figura 3.3, fazendo com que o fator de intensidade de tensão efetivo local K_e seja reduzido. O critério para a fratura é adotado, tal que [26,45]:

$$K_e = K_i - \sum K_{Si} = K_{IC}, \tag{3.17}$$

onde K_e é o fator de intensidade de tensão aplicado no ponto Z , $\sum K_{Si}$ é o somatório de toda a contribuição do fator de intensidade de tensão devido ao efeito de blindagem das discordâncias no ponto Z e K_{IC} é o valor crítico da tenacidade à fratura do material. O subscrito i denota o modo de fratura envolvido ou o modo de carregamento a que a trinca é submetida.

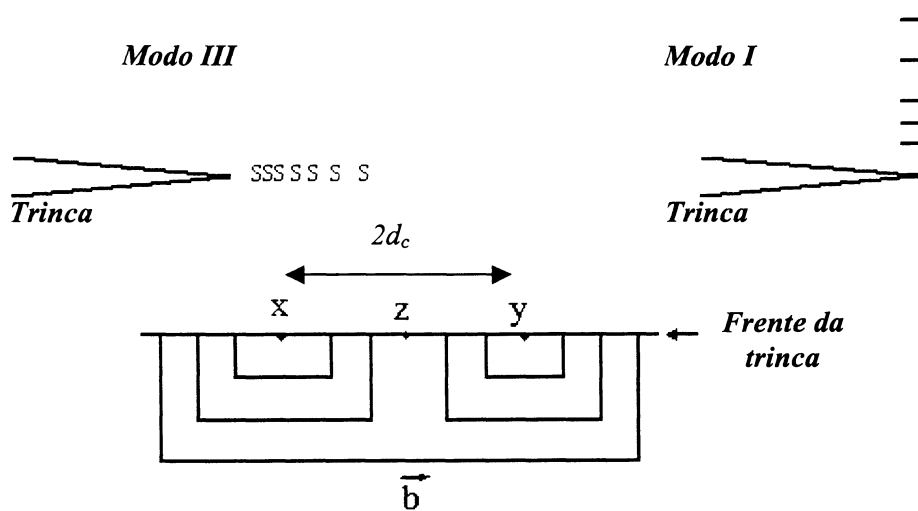


Figura 3.3 – Modelo proposto para os modos III e I de carregamento. Laços de discordâncias são emitidos das fontes em X e Y, e viajam na frente da trinca para blindar o ponto Z [11].

Em 1993, Brede [57] realizou estudos da transição frágil-dúctil em silício, por meio de experimentos e simulações numéricas de uma trinca carregada em modo I, e discordâncias emitidas em um plano inclinado de deslizamento. Os experimentos foram realizados com o ensaio de flexão em quatro pontos e nas simulações numéricas, foram utilizadas as equações de Li & Thomson [20].

Em baixas temperaturas, a tenacidade à fratura cresce lentamente, com uma pequena zona plástica relativamente homogênea. Em temperaturas próximas da temperatura de transição frágil-dúctil T_C , ocorre um aumento rápido da tenacidade à fratura, sendo observado também um aumento rápido na plasticidade ao redor da trinca. A transição é suave para a fratura semi-frágil, com uma pequena zona plástica relativamente homogênea, precedendo uma transição abrupta para plasticidade.

O fenômeno da transição frágil-dúctil também foi estudado, em 1994, por *Nitzche & Hsia* [58]. Segundo eles, a temperatura de transição frágil-dúctil (*BDT*) marca uma competição entre a fratura por clivagem e a ativação de discordâncias na ponta da trinca e ainda, a transição pode ser determinada por um dos dois processos sucessivos, a nucleação ou a mobilidade de discordâncias.

Quando uma trinca é carregada em modo I, este modelo prevê que a *BDT* é controlada pela mobilidade de discordâncias. A teoria da plasticidade isotrópica é usada, e a blindagem na ponta da trinca devido à deformação plástica é avaliada usando o método dos elementos finitos [58]. Os resultados numéricos estão em boa concordância com os resultados experimentais de *Brede & Haasen* [35] para diferentes taxas de carregamento.

Um modelo numérico bidimensional empregado por *Hartmaier & Gumbsch* [59], em 1999, é usado para estudar as discordâncias ativadas na vizinhança da ponta da trinca. As discordâncias são em cunha e com a direção das linhas paralela à frente da trinca. Somente um plano de deslizamento em um ângulo de 72° para o plano da trinca é considerado. A trinca é carregada no modo de abertura, ou seja, o modo I, para um fator de intensidade de tensão aplicada $K_I = K$. A força total, f_{tot} , atuando em cada discordância é expressa por [59]:

$$f_{tot} = f_{Kd} + f_{dd} + f_{dd'} + f_{fric} , \quad (3.18)$$

onde f_{Kd} é a força causada pelo fator de intensidade de tensão aplicada, f_{dd} é a força imagem devido à presença da superfície livre da trinca e $f_{dd'}$ é a força de interação com todas as outras discordâncias, que também inclui a interação transmitida pela superfície livre. A quantidade f_{fric} é a força de atrito da rede de discordâncias, que é sempre oposta à direção do movimento.

A mobilidade de discordâncias é descrita por uma lei empírica do tipo *Arrhenius* e a dependência do expoente da tensão com a temperatura é assumido ser da forma:

$$m(T) = \alpha + \frac{\beta}{T} , \quad (3.19)$$

onde α e β são dois parâmetros determinados do expoente da tensão.

Nesse modelo, foi observado que a dependência da tenacidade à fratura com a taxa de deformação e a temperatura, que é obtida pela simulação numérica, reflete todas as não-linearidades do movimento térmicamente ativado das discordâncias ao redor da trinca. Uma correlação entre a tenacidade à fratura e o número de discordâncias emitido para diferentes taxas de carregamento é obtido, indicando que a taxa de carregamento e a temperatura estão fortemente correlacionadas e uma relação de escala é alcançada. Uma formulação implícita desta relação de escala entre as taxas de carregamento \dot{K}_i e as temperaturas T_i , em qualquer dada tenacidade à fratura K_{crit} é alcançada quando [59]:

$$K_{crit} \left(\dot{K}_i, T_i \right) = const.. \quad (3.20)$$

Esta equação não pode ser resolvida para todo o valor de K_{crit} pois parte dos resultados não estão correlacionados, segundo *Hartmaier & Gumbsch* [59]. A relação entre essas duas quantidades é dada por uma lei de escala, para qual uma simples relação de *Arrhenius* [59]:

$$T_2 = \left[\frac{k}{U} \ln \frac{\dot{K}_1}{\dot{K}_2} + \frac{1}{T_1} \right]^{-1}, \quad (3.21)$$

é obedecida. Esta relação prevê que uma curva $T - K_{crit}$ obtida para uma taxa de carregamento \dot{K}_1 , pode ser transformada em uma outra curva $T - K_{crit}$ para uma taxa de carregamento \dot{K}_2 , em uma escala apropriada do eixo de temperatura. Este comportamento de escala pode ser usado para determinar o valor da energia de ativação.

As principais considerações desse estudo são que: com o acréscimo da temperatura, a mobilidade de discordâncias assume o controle da taxa de nucleação e a tenacidade à fratura torna-se dependente da taxa de carregamento. Tanto experimentalmente como numericamente, a tenacidade à fratura decresce proporcionalmente ao logaritmo da taxa de carregamento.

3.3. RESUMO DOS PRINCIPAIS MODELOS DA TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL

A tabela 3.1 apresenta de forma resumida as siglas de cada modelo, as premissas e as equações dos principais modelos da transição frágil-dúctil.

Modelo	Premissas	Tensões atuantes sobre as discordâncias na zona plástica
Majumdar & Burns (MB)	trinca infinita, modelo analítico estático e modo III.	$\int_e^a \sqrt{\frac{x'}{x}} \frac{1}{(x'-x)} f(x') dx' = \sqrt{\frac{2\pi}{x}} \frac{K_{III}}{\mu b} - \frac{2\pi\sigma_f}{\mu b}$
Chang & Ohr (CO)	trinca finita, modelo analítico estático e modos II e III.	$\frac{\mu b}{2\pi} \left(\int_{-a}^{-e} + \int_{-c}^a + \int_e^a \right) \frac{f(x')}{x-x'} dx' + \sigma_a = 0 \quad (\text{trinca})$ $\frac{\mu b}{2\pi} \left(\int_{-a}^{-e} + \int_{-c}^c + \int_e^a \right) \frac{f(x')}{x-x'} dx' + \sigma_a = \sigma_f \quad (\text{zona plástica})$
Chen & Kitaoka (CK)	trinca infinita, modelo analítico estático e modo I.	$\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_e^a \frac{f(x)}{r-x} dx = \sigma(r)$ $\sigma(r) = \sigma_f - \frac{K_I \text{sen } \theta \cos \frac{1}{2} \theta}{2\sqrt{2\pi r}}$
Hirsch, Roberts & Samuels (HRS)	Trinca infinita, modelo numérico dinâmico e modos I e III.	$\sigma_I = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \left(\frac{y_j}{y_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(y_i - y_j)} + \frac{8y_i y_j^2}{(y_i + y_j)^3 (y_i - y_j)} \right\}$ $\sigma_{III} = \frac{K_{III}}{(2\pi x_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi x_i} + \frac{\mu b}{2\pi} \sum_{j \neq i} \left(\frac{x_j}{x_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(x_i - x_j)}$

Tabela 3.1 – Resumo dos principais modelos da transição frágil-dúctil.

CAPÍTULO 4

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Este capítulo descreve o algoritmo do modelo teórico usado nas simulações numéricas, bem como as equações utilizadas. O algoritmo que será descrito ao longo deste capítulo é similar ao do modelo HRS [45,46], que foi discutido no capítulo 3, e baseado no programa desenvolvido por *Serbena* [11]. O programa aqui descrito também foi utilizado com modificações para simular a dinâmica da zona plástica, segundo o modelo CK [43,44]. O algoritmo do programa é escrito em linguagem *Fortran 77*, para ambiente *Windows 98*.

Uma comparação entre os modos de fratura estudados é apresentada, por meio de gráficos, do tamanho da zona plástica, tensão nas discordâncias ao longo da zona plástica, número de discordâncias, o fator de intensidade de tensão efetivo local e tamanho da zona livre de discordâncias, em função do fator de intensidade de tensão aplicada. A função distribuição de discordâncias também é apresentada em função da posição ao longo do plano de deslizamento. O comportamento dos campos de tensão ao longo da zona plástica também são apresentados de forma comparativa entre os diferentes modos de fratura.

4.1. DESCRIÇÃO DO MODELO USADO NAS SIMULAÇÕES

As simulações assumem uma fonte de *Frank-Read* posicionada a uma distância x_c ou y_c na frente da trinca e que discordâncias em laços são nucleadas quando a tensão na fonte é suficiente para expandir o laço. As discordâncias movem-se para fora da ponta da trinca para formar a zona plástica, deixando atrás de si uma zona livre de discordâncias, como observado por microscopia eletrônica nos estudos realizados por *Ohr* [42].

A zona plástica na ponta da trinca é simplificada por um único plano de deslizamento, que intercepta o plano da trinca. O ângulo entre o plano de deslizamento e o plano da trinca é θ . A figura 4.1 (a)-(c) mostra de forma esquemática, representações de trincas submetidas a diferentes modos de carregamento. Em (a) a trinca é submetida ao modo I de carregamento, e $\theta = 90^\circ$. Em (b) e (c) as trincas são submetidas aos modos II e III respectivamente, e nos dois casos $\theta = 0^\circ$. Nos três casos (a), (b) e (c), as discordâncias são emitidas próximo à ponta da trinca e deixam atrás de si uma zona livre de discordâncias (DFZ), e então se juntam com outras discordâncias para formar a zona plástica. A fonte de Frank-Read é posicionada no plano de deslizamento em uma distância fixa x_c ou y_c igual a $10b$ adiante da ponta da trinca para essas simulações.

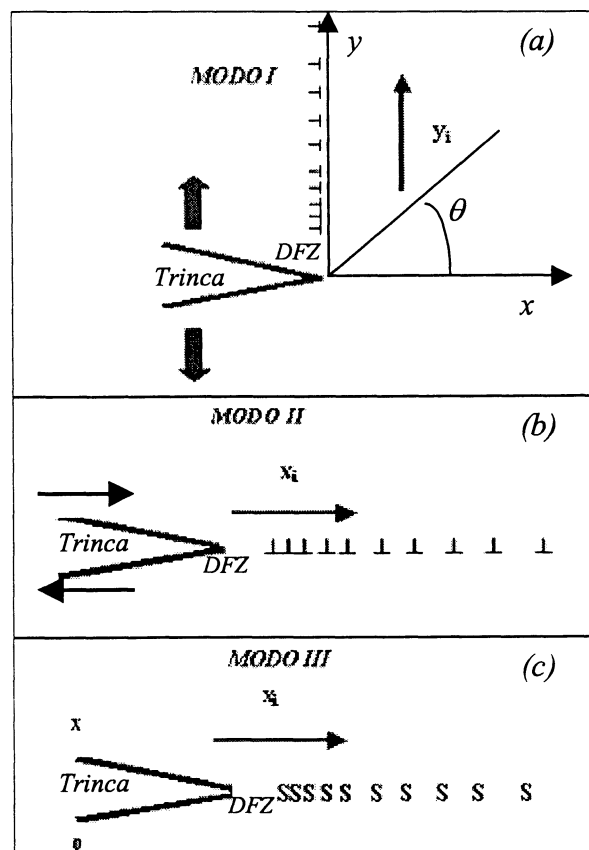


Figura 4.1 – Em (a) uma trinca é carregada em modo I e discordâncias em cunha são emitidas em um plano perpendicular ao plano da trinca, em (b) uma trinca é carregada em modo II e discordâncias são emitidas em um plano coplanar ao plano da trinca e em (c) a trinca é carregada em modo III e discordâncias em hélice são emitidas em um plano coplanar ao plano da trinca.

A fonte emite uma única discordância em cunha (modos I e II) ou em hélice (modo III) sempre que a tensão na fonte for positiva. As tensões de cisalhamento em quaisquer discordâncias em cunha posicionadas a uma distância y_i (para o modo I) e

discordâncias em cunha e em hélice posicionadas a uma distância x_i (para os modos II e III) emitidas da ponta da trinca são dadas pelas expressões [11,45,46]:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \left(\frac{y_j}{y_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(y_i - y_j)} + \frac{8y_i y_j^2}{(y_i + y_j)^3 (y_i - y_j)} \right\}, \quad (4.1)$$

$$\sigma_{yz} = \frac{K_{II}}{(2\pi x_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)x_i} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left(\frac{x_j}{x_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(x_i - x_j)}, \quad (4.2)$$

$$\sigma_{xz} = \frac{K_{III}}{(2\pi x_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi x_i} + \frac{\mu b}{2\pi} \sum_{j \neq i} \left(\frac{x_j}{x_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(x_i - x_j)}, \quad (4.3)$$

onde y_j e y_i são as posições da j -ésima e da i -ésima discordância em cunha (modo I), x_j e x_i são as posições da j -ésima e i -ésima discordâncias em cunha e em hélice (modos II e III respectivamente), K_I é o fator de intensidade de tensão do modo I aplicado, K_{II} é o fator de intensidade de tensão do modo II aplicado, K_{III} é o fator de intensidade de tensão do modo III aplicado, μ é o módulo de cisalhamento igual a 50 GPa, b é o vetor de Burgers da discordância em cunha igual a 4 \AA e ν é o coeficiente de Poisson igual a 0,3.

Nas equações 4.1 a 4.3, o 1º termo corresponde ao campo de tensão elástico da ponta da trinca, o 2º termo à tensão imagem e o 3º termo à interação discordância-discordância na presença da trinca. A mobilidade das discordâncias é descrita por uma lei empírica do tipo *Arrhenius* dada por [11]:

$$V = A \sigma^m \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (4.4)$$

onde m é o expoente da tensão igual a 1, A é uma constante igual a $1,05 \times 10^{-5} \text{ m.s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$, T é a temperatura igual a 473 K, U é a energia de ativação para a mobilidade térmica da discordância igual a 1 eV, σ é a tensão de cisalhamento e k é a constante de Boltzmann. Esses valores utilizados, são baseados em resultados experimentais de materiais semi-condutores e são valores fixos nas simulações numéricas. Os materiais semi-condutores possuem baixos valores para o expoente da tensão, e por isso, foram utilizados para que

o tempo de processamento computacional não ficasse elevado, efetuando-se posteriormente, comparações entre simulações numéricas e modelos analíticos [11].

Foi assumido que os laços de discordâncias são nucleados quando a tensão em uma distância x_c na frente da trinca é suficiente para expandir o laço (discordância), então nas equações 4.1 a 4.3 são feitas as substituições $x_i = x_c$ e $y_i = y_c$, somente no 1º e no 2º termos dessas equações. Desta forma, para a trinca submetida aos modos I, II e III, a primeira discordância é emitida em valores críticos do fator de intensidade de tensão aplicada $K = K_N$, dados respectivamente por:

$$K_{NI} = \frac{\mu b}{(1-\nu)\sqrt{\pi y_c}}, \quad (4.5)$$

$$K_{NII} = \frac{\mu b}{(1-\nu)\sqrt{8\pi x_c}}, \quad (4.6)$$

$$K_{NIII} = \frac{\mu b}{\sqrt{8\pi x_c}}, \quad (4.7)$$

onde as grandezas y_c e x_c são as posições das fontes de *Frank-Read*.

As simulações ocorrem em uma taxa fixa de carregamento $\dot{K} = 1,0 \times 10^{-3} \text{ MPa.m}^{1/2} \cdot \text{s}^{-1}$. Em cada ciclo do programa, o tempo para cada discordância deslocar-se o equivalente a um terço da distância da sua vizinha é calculado. O menor tempo é assumido como sendo δt . A cada intervalo de tempo δt (o passo do programa), a fonte é examinada para ver se uma discordância pode ser nucleada. Se a tensão na fonte é positiva, então uma discordância é emitida pela fonte e a tensão em todas as discordâncias é calculada e então elas movem-se uma distância igual à $\delta t V_i$. O fator intensidade de tensão K é aumentado por $\delta t \dot{K}$. Em cada ciclo, o programa usa as posições das discordâncias para calcular o fator de intensidade de tensão efetivo local K_e na ponta da trinca, tal que [45,46]:

$$K_e = K - K_S, \quad (4.8)$$

em que K_S é o fator de intensidade de tensão devido ao efeito da blindagem causado pela interação entre trinca–discordância. Os efeitos da blindagem de discordâncias na ponta da trinca para os modos I, II e III são dados respectivamente por [60]:

$$K_{SI} = \frac{3\mu b}{4(1-\nu)\sqrt{\pi y_i}}, \quad (4.9)$$

$$K_{SII} = \frac{\mu b}{(1-\nu)\sqrt{2\pi x_i}}, \quad (4.10)$$

$$K_{SIII} = \frac{\mu b}{\sqrt{2\pi x_i}}, \quad (4.11)$$

onde K_{SI} , K_{SII} e K_{SIII} são os fatores de intensidade de tensão aplicada devido aos efeitos da blindagem para os modos I, II e III respectivamente.

Como o tempo t e a intensidade de tensão aplicada K aumentam no modelo, K_e também aumenta, aumentando também o número de discordâncias emitidas pela fonte e o tamanho da zona plástica. O critério de fratura usado no modelo é quando $K_e = K_{IC}$, definindo assim o fator de intensidade de tensão da fratura K_F .

Devido ao tempo de processamento do computador aumentar aproximadamente com $n!$ (fatorial de n , onde n é o número de cálculos realizados pelo computador, e neste caso, é o número de superdiscordâncias), o algoritmo agrupa as discordâncias com o objetivo de diminuir o tempo de simulação. As discordâncias são agrupadas e formam uma superdiscordância que possui um vetor de Burgers Nb , onde N é o número de discordâncias agrupadas. A zona plástica assume uma configuração igual a $1b.1b.1b.3b.3b.3b.9b.9b.9b.27b.27b.27b...Nb...27b.27b.27b.9b.9b.9b.3b.3b.3b.1b.1b.1b$. Para um tempo de simulação não muito longo, foi observado que o agrupamento de discordâncias não modifica os resultados, se comparado com um algoritmo que não possui este.

Simulações numéricas também foram realizadas segundo o modelo CK [43,44], cujos resultados serão apresentados na seção 6.1. O procedimento utilizado foi o mesmo do que o anteriormente descrito. As diferenças são que a tensão entre as discordâncias é dada numa forma mais simplificada, de modo que no modelo CK, a tensão de

cisalhamento em quaisquer discordâncias em cunha posicionada a uma distância y_i (para o modo I) emitidas da ponta da trinca é dada por [43,44]:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \frac{1}{(y_i - y_j)}, \quad (4.12)$$

onde as variáveis já foram definidas. Na equação 4.12, o 1º termo corresponde ao campo de tensão elástico da ponta da trinca, o 2º termo à tensão imagem e o 3º termo à interação discordância–discordância sem a presença da trinca.

4.2. COMPARAÇÃO ENTRE OS MODOS DE CARREGAMENTO SEGUNDO O MODELO HRS

Após a realização de várias simulações numéricas, pode-se expor nesta seção alguns dos resultados extraídos desta ferramenta de trabalho. A figura 4.2 (a)-(c) apresenta o gráfico da tensão total e a contribuição de seus termos em função da posição ao longo da zona plástica.

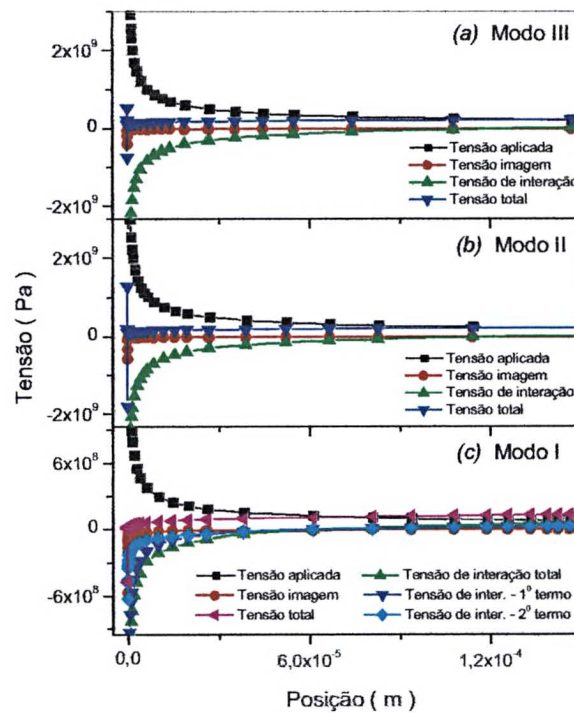


Figura 4.2 – Em (a), (b) e (c) são apresentados os gráficos da tensão total e as contribuições de seus termos em função da posição ao longo da zona plástica.

Observa-se pelos gráficos da figura 4.2 (a)-(c), que uma elevada concentração de tensão está presente na região próxima à ponta da trinca, e isto ocorre devido ao termo da tensão aplicada nos três modos de fratura estudados. O termo da tensão imagem é praticamente desprezível, frente aos demais termos de tensão para distâncias longe da trinca.

O termo de interação entre discordância–discordância na presença da trinca exerce uma grande contribuição em relação aos outros termos em regiões próximas à ponta da trinca. O termo da tensão de interação da trinca em modo I descrito na equação 4.1, representado graficamente na figura 4.2 (c), é composto da soma de dois termos. O 1º e o 2º termos da tensão de interação são dados respectivamente por:

$$\frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \left(\frac{y_j}{y_i} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(y_i - y_j)} \right\}, \quad (4.13)$$

$$\frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{8y_i y_j^2}{(y_i + y_j)^3 (y_i - y_j)} \right\}. \quad (4.14)$$

A análise a ser feita, é que o 2º termo representado pela equação 4.14 domina o 1º termo representado pela equação 4.13 nas proximidades da ponta da trinca. A tensão total é aproximadamente constante ao longo da zona plástica, em todos os modos de fratura, como mostrado na figura 4.2 (a)-(c).

Os gráficos da figura 4.3 (a)-(e) apresentam o comportamento do tamanho da zona plástica a , a tensão nas discordâncias ao longo da zona plástica σ , o número de discordâncias n , o fator de intensidade de tensão efetivo local K_e e o tamanho da zona livre de discordâncias e em função do fator de intensidade de tensão aplicada K . O gráfico da figura 4.3 (f) apresenta o comportamento da função de distribuição de discordâncias $f(x)$ em função da posição x ao longo da zona plástica.

Pelos gráficos, pode-se observar que os modos II e III apresentam um comportamento similar. Isto fica mais claro se compararmos o tamanho da zona plástica e a tensão ao longo da zona plástica, que possuem aproximadamente os mesmos valores. A zona plástica para a trinca em modo I possui um tamanho menor em relação aos modos II e III.

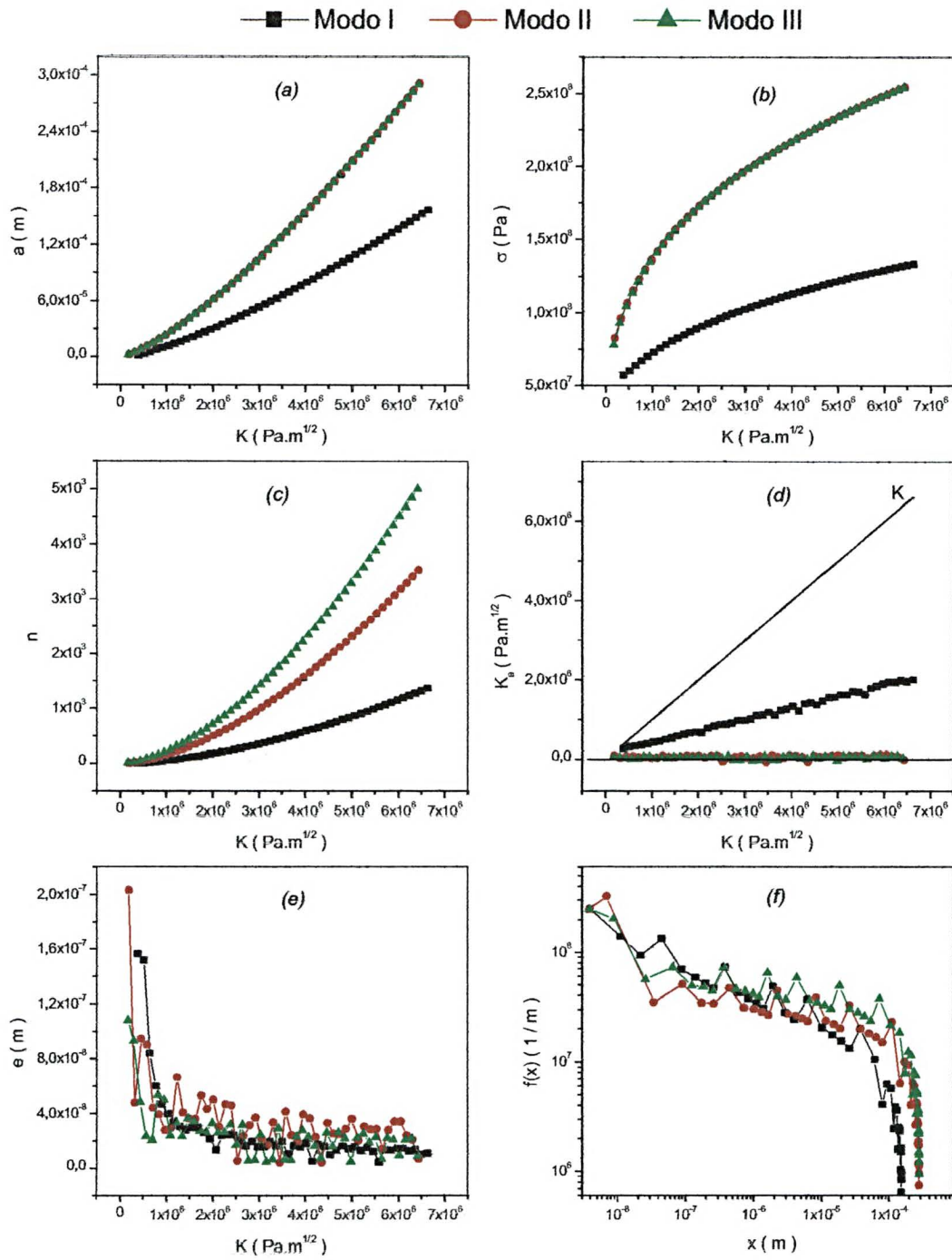


Figura 4.3 – Em (a)-(e) são mostrados os gráficos do tamanho da zona plástica, tensão ao longo da zona plástica, número de discordâncias, fator de intensidade de tensão efetivo local, tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada. Em (f) é mostrada a função de distribuição de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.

O modo III apresenta um número mais elevado de discordâncias emitidas pela fonte de *Frank-Read*, seguido dos modos II e I. Devido a este elevado número de discordâncias emitidas, o efeito de blindagem nos modos III e II é muito mais forte do que no modo I, que emite um número bem menor de discordâncias. Isto fica mais claro de ser observado na figura 4.3 (d), onde os fatores de intensidade de tensão efetivos locais para os modos III e II possuem valores bem mais baixos em comparação ao modo I que emite um número menor de discordâncias.

A zona livre de discordâncias sofre uma variação em seu tamanho quando o fator de intensidade de tensão aplicada é aumentado, e esta variação está presente nos três modos de fratura estudados por simulação numérica. A função de distribuição de discordâncias é calculada para os modos II e III, via simulação por:

$$f(x) = \frac{1}{x_i - x_{i-1}}, \quad (4.15)$$

onde x_i e x_{i-1} são as posições da i -ésima e $(i-1)$ -ésima discordâncias na zona plástica. E para o modo I, tem-se:

$$f(y) = \frac{1}{y_i - y_{i-1}}, \quad (4.16)$$

onde y_i e y_{i-1} são as posições da i -ésima e $(i-1)$ -ésima discordâncias na zona plástica. O que se observa no gráfico da figura 4.3 (f), é que a função distribuição de discordâncias apresenta aproximadamente a mesma forma para os três os modos de fratura, sendo que os modos II e III possuem comportamentos mais próximos e ainda possuem um tamanho de zona plástica superior em relação ao modo I de fratura. As oscilações observadas neste gráfico são devido ao agrupamento de discordâncias na zona plástica. Foram monitoradas três discordâncias pelo algoritmo: a 1^a sempre posicionada na fonte de discordâncias, a 2^a caminhando pela zona livre de discordâncias (DFZ) ou chegando no fim desta região (posição correta) e a 3^a sempre dentro da zona plástica. A 2^a discordância é utilizada para definir o tamanho da (DFZ) em relação a ponta da trinca, e é por isso que as oscilações na figura 4.3 (e) são observadas e estão relacionadas com este fato. A DFZ é uma região elástica que possui uma elevada concentração de tensão e onde as discordâncias viajam em velocidades elevadas.

CAPÍTULO 5

MODELOS ANALÍTICOS

Este capítulo descreve os modelos analíticos dinâmicos que foram desenvolvidos neste trabalho para os modos de carregamento estudados, com base nos modelos HRS [45,46] e CK [43,44], que foram discutidos no capítulo 3. O modelo analítico para os modos II e III é uma generalização do modelo analítico para o modo III desenvolvido por *Serbena* [11], baseado no modelo HRS e que é detalhado na seção 5.1.

Para os modos II e III, segundo o modelo HRS, serão apresentadas expressões analíticas para o tamanho da zona plástica a , tensão ao longo da zona plástica σ , número de discordâncias n e o fator de intensidade de tensão efetivo local K_e , em função do fator de intensidade de tensão aplicado, K . Para o modo I, segundo o modelo HRS, não foi possível resolver o problema completamente devido à dificuldades na obtenção de uma solução analítica da equação integral singular obtida. Entretanto, foram obtidas expressões para o tamanho e para a tensão ao longo da zona plástica em função de uma constante. Já para o modo I segundo o modelo CK, expressões analíticas dinâmicas foram obtidas de modo análogo às obtidas para os modos II e III.

As expressões analíticas são obtidas a partir da resolução de equações integrais singulares, e as equações obtidas são escritas em termos de integrais elípticas completas de 1ª, 2ª e 3ª classes. Assumindo que o tamanho da zona plástica é muito maior que o tamanho da zona livre de discordâncias, ou seja, $a \gg e$, expressões em uma forma mais simples e elegante são obtidas.

5.1. FORMULAÇÃO DO MODELO ANALÍTICO PARA OS MODOS II E III

Serão consideradas as mesmas suposições que as do modelo HRS [11,45,46]. Consideramos uma trinca solicitada sob o modo III, como mostra a figura 5.1 (a). A

trinca é carregada sob a ação de um fator de intensidade de tensão aplicada K_{III} , que quando atinge o valor do fator de intensidade de tensão crítica K_0 , uma fonte de discordância é imediatamente formada na frente da trinca. É assumido neste modelo, que as fontes emitem discordâncias logo após delas terem sido formadas, e elas estão separadas por uma distância igual a $2d_c$. Os diferentes segmentos do laço, figura 5.1 (a), viajam a velocidades iguais. No momento em que os segmentos das discordâncias em laço se encontram em uma distância igual à d_c as componentes em cunha são canceladas. A região onde a fratura inicia é assumida ser o ponto Z, que é situado entre as posições das fontes. Este ponto é blindado quando as discordâncias o alcançam.

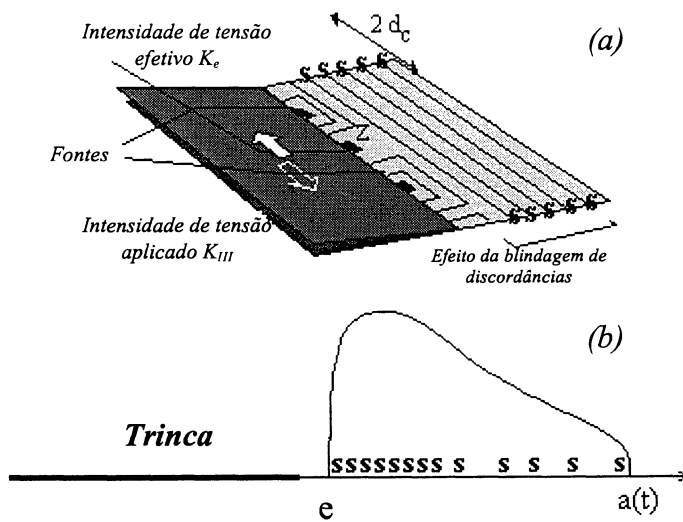


Figura 5.1 – (a) Zona plástica composta por discordâncias em hélice e fontes de discordâncias na ponta da trinca em modo III e (b) representação unidimensional da zona plástica dependente do tempo [11].

A figura 5.1 (b) mostra uma representação unidimensional da zona plástica, que é considerada sob um carregamento que aumenta linearmente no tempo e formada por uma distribuição contínua de discordâncias em hélice com vetor de Burgers infinitesimal. Para o caso do modo II, discordâncias em cunha são emitidas das fontes. As discordâncias emitidas viajam uma distância e na frente da ponta da trinca, ou seja, a zona livre de discordâncias, e juntam-se a zona plástica. O resultado é que a zona plástica estende-se de e para a distância $a(t)$ e aumenta continuamente com o tempo. É assumido que um grande número de discordâncias são emitidas e por isso a distribuição discreta de discordâncias é substituída por uma distribuição contínua $f(x,t)$.

Se uma superfície é considerada entre a ponta da trinca e e , e a outra em uma posição x para dentro da zona plástica como mostrado na figura 5.1 (b), então tem-se que [11]:

$$\frac{d}{dt} \int_e^x f(x,t) dx = \frac{d}{dt} n(t) - V(x,t) f(x,t), \quad (5.1)$$

onde $\frac{dn(t)}{dt}$ é a taxa do número de discordâncias geradas por fontes no tempo t , $V(x,t)$ é a velocidade das discordâncias na posição x em um dado tempo t e $f(x,t)$ é a função distribuição de discordâncias dependente do tempo e da posição. Mas como [11]:

$$\frac{d}{dt} n(t) = \frac{d}{dt} \int_e^{a(t)} f(x,t) dx, \quad (5.2)$$

onde $a(t)$ é o tamanho da zona plástica dependente do tempo e e é o tamanho da zona plástica.

A velocidade das discordâncias é dada por [11]:

$$V(x,t) = \frac{1}{f(x,t)} \frac{d}{dt} \int_x^{a(t)} f(x,t) dt. \quad (5.3)$$

A trinca é considerada sob um carregamento $\dot{K}t$, onde \dot{K} é a taxa do fator de intensidade de tensão aplicada e constante. Uma discordância situada em uma posição x à frente da trinca experimenta uma tensão total de cisalhamento dada por:

$$\sigma_{ij} = \frac{\dot{K}(t+t_0)}{\sqrt{2\pi x_i}} + \frac{\mu b}{2\pi\xi} \int_e^a \sqrt{\frac{x_j}{x_i}} \frac{f(x_j,t)}{(x_i - x_j)} dx_j, \quad (5.4)$$

onde $\dot{K}t_0$ é o fator de intensidade de tensão aplicada K_0 no momento em que as fontes de discordâncias são formadas, x_i e x_j são as posições da i -ésima e j -ésima discordâncias respectivamente, μ é o módulo de cisalhamento, b é o vetor de Burgers e σ_{ij} é a tensão total de cisalhamento e os subscritos i e j indicam o modo de carregamento envolvido.

Se $\sigma_{ij} = \sigma_{xz}$, a trinca está carregada sob modo III, e se $\sigma_{ij} = \sigma_{yz}$, a trinca está carregada no modo II.

O termo da direita, na equação 5.4, é a tensão de interação entre discordâncias, enquanto que o da esquerda é o termo da tensão aplicada na trinca. O termo da tensão imagem não foi incluído, pois é proporcional ao inverso da distância. Através da simulação numérica foi verificado que este termo não contribui para a tensão total de cisalhamento para grandes distâncias da ponta da trinca, para os modos II e III. A grandeza escalar ξ é uma constante que está presente no termo de interação e que diferencia o modo de fratura envolvido, como segue:

$$\xi = 1 \quad \Rightarrow \quad \text{modo III,} \quad (5.5)$$

$$\xi = (1 - \nu) \quad \Rightarrow \quad \text{modo II,} \quad (5.6)$$

onde ν é o coeficiente de *Poisson*.

É assumido que a dependência da velocidade de discordâncias com a tensão total de cisalhamento pode ser expressa por uma relação empírica do tipo *Arrhenius* dada por [11]:

$$V = A \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \sigma_{ij}^m = V_0 \sigma_{ij}^m, \quad (5.7)$$

onde A é uma constante, m é o expoente da tensão, U é a energia de ativação para a mobilidade das discordâncias, T é a temperatura e k é a constante de *Boltzmann*.

Combinando as equações 5.3, 5.4 e 5.7; tem-se:

$$\frac{\sqrt{x}}{V_0^{1/m}} \left(\frac{1}{f(x,t)} \frac{d}{dt} \int_x^{a(t)} f(x,t) dx \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\mu b}{2\pi\xi} \int_e^a \frac{\sqrt{u} f(u,t)}{x-u} du. \quad (5.8)$$

Na equação 5.8, foi realizada a troca $x_i = x$ e $x_j = u$ para facilitar a notação. Devido esta equação ser de difícil resolução, uma aproximação é necessária. É assumido que a tensão total de cisalhamento atuando em cada discordância dentro da zona plástica é a mesma para um determinado tempo t . Isto é verificado durante as simulações

numéricas do presente problema, onde a velocidade de todas discordâncias dentro da zona plástica não varia mais que 30%. Por isso, será assumido que a velocidade das discordâncias dentro da zona plástica é constante e igual a da/dt . Então, a equação 5.8 torna-se:

$$\frac{\sqrt{x}}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\mu b}{2\pi\xi} \int_e^a \frac{\sqrt{u} f(u,t)}{x-u} du. \quad (5.9)$$

É assumido que, para resolver a equação 5.9, a função distribuição de discordâncias ou função de densidade de discordâncias $f(x,t)$ pode ser escrita como:

$$f(x,t) = \frac{K(t+t_0)}{\sqrt{a(t)}} R(\alpha), \quad (5.10)$$

onde $\alpha = x/a(t)$ e $R(\alpha)$ é uma função de distribuição de discordâncias. Por isso a equação 5.9 pode ser escrita como segue:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{K(t+t_0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{2\pi\xi\sqrt{\alpha}} \int_{\alpha_c}^1 \frac{\sqrt{u} R(u)}{\alpha-u} du = C, \quad (5.11)$$

onde $\alpha = x/a$, $\alpha_c = e/a$ e C é uma constante arbitrária. A equação 5.11 é uma equação integral singular e pode ser resolvida analiticamente. O termo da esquerda representa a evolução temporal do tamanho da zona plástica, enquanto que o termo da direita é similar ao caso de um empilhamento estático de discordâncias na ponta da trinca carregada por um fator de intensidade de tensão aplicada e sob o equilíbrio de uma tensão de fricção.

A equação 5.11 pode ser resolvida usando o método do teorema da inversão desenvolvido por *Muskhelishvili* [54] e descrito por *Head & Louat* [61]. É assumido que $R(\alpha_c) = R(1) = 0$ e então a função $R(\alpha)$ é dada por [11]:

$$R(\alpha) = -\frac{2\xi}{\pi\mu b} \sqrt{\frac{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}{\alpha}} \int_{\alpha_c}^1 \frac{1/2\pi - C\sqrt{u}}{\sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha}. \quad (5.12)$$

Para que a equação 5.12 seja válida, a condição apresentada a seguir deve ser satisfeita:

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1/2\pi - C\sqrt{u}}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} du = 0, \quad (5.13)$$

isto para que a função $R(\alpha)$ seja nula em e e a .

As soluções para as equações 5.12 e 5.13, conforme *Byrd & Friedman* [62] e *Majumdar & Burns* [39], são dadas por:

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} \equiv 0, \quad (5.14)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} = -2 \cdot \frac{\alpha_c}{\alpha-\alpha_c} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c(1-\alpha_c)}{\alpha-\alpha_c}, k\right), \quad (5.15)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} du = \pi, \quad (5.16)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} du = 2 \cdot E\left(\frac{\pi}{2}, k\right), \quad (5.17)$$

onde $k = \sqrt{1-\alpha_c}$ é o módulo das integrais elípticas completas, $E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ e

$\Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c(1-\alpha_c)}{\alpha-\alpha_c}, k\right)$ são as integrais elípticas completas de segunda e terceira classe respectivamente.

Para resolver a equação 5.12, as equações 5.14 e 5.15 serão utilizadas como segue:

$$R(\alpha) = -\frac{2\xi}{\pi\mu b} \sqrt{\frac{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}{\alpha}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \frac{1/2\pi}{\sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} - \int_{\alpha_c}^1 \frac{C\sqrt{u}}{\sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} \right] \quad (5.18)$$

A integral da esquerda é nula enquanto que a integral da direita será escrita em termos de uma integral elíptica completa de terceira classe, de modo que a função é descrita pela expressão [11]:

$$R(\alpha) = -\frac{4\xi C}{\mu b \pi} \cdot \alpha_c \cdot \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c(1-\alpha_c)}{\alpha-\alpha_c}, k\right). \quad (5.19)$$

A constante C é determinada da equação 5.13, com o uso das equações 5.16 e 5.17, o que resulta em:

$$C = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}. \quad (5.20)$$

5.2. FORMULAÇÃO DOS MODELOS ANALÍTICOS PARA O MODO I

Os procedimentos e as abordagens matemáticas que serão usados para descrever os modelos analíticos para uma trinca sob o modo I são iguais ao descrito na seção 5.1. Discordâncias em cunha são emitidas pelas fontes de discordâncias em um plano perpendicular ao plano da trinca, e agrupam-se no plano de deslizamento para formar a zona plástica. Serão realizadas duas abordagens segundo os modelos HRS [45,46] e CK [43,44].

5.2.1 Modelo analítico segundo o modelo HRS

A discordância situada em uma posição y em frente da trinca experimenta uma tensão total de cisalhamento dada por [45,46]:

$$\sigma_{xy} = \frac{K(t+t_0)}{4\sqrt{\pi y_i}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \left[\int_e^a \sqrt{\frac{y_j}{y_i}} \frac{f(y_j, t)}{y_i - y_j} dy_j + \int_e^a \frac{8y_i y_j^2 f(y_j, t)}{(y_i + y_j)^3 \cdot (y_i - y_j)} dy_j \right], \quad (5.21)$$

onde y_i e y_j são as posições da i -ésima e j -ésima discordâncias respectivamente e σ_{xy} é a tensão total de cisalhamento devido ao modo I. Combinando as equações 5.3, 5.21 e 5.7; temos:

$$\frac{\sqrt{y}}{V_0^{1/m}} \left(\frac{1}{f(y,t)} \frac{d}{dt} \int_y^{a(t)} f(y,t) dy \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{4\sqrt{\pi}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \left[\int_e^a \frac{\sqrt{u} f(u,t)}{y-u} du + \int_e^a \frac{8y^{3/2} u^2 f(u,t)}{(y+u)^3 \cdot (y-u)} du \right]. \quad (5.22)$$

Assumindo que a velocidade das discordâncias dentro da zona plástica é constante e igual a da/dt , obtêm-se:

$$\frac{\sqrt{y}}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{4\sqrt{\pi}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \left[\int_e^a \frac{\sqrt{u} f(u,t)}{y-u} du + \int_e^a \frac{8y^{3/2} u^2 f(u,t)}{(y+u)^3 \cdot (y-u)} du \right]. \quad (5.23)$$

Reescrevendo a equação 5.23, encontra-se:

$$\frac{\sqrt{y}}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{4\sqrt{\pi}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \left[\int_e^a \left(\sqrt{u} + \frac{8y^{3/2} u^2}{(y+u)^3} \right) \frac{f(u,t)}{(y-u)} du \right]. \quad (5.24)$$

É assumido que para resolver a equação 5.24, a função distribuição de discordâncias ou função de densidade de discordâncias $f(y,t)$ pode ser escrita como:

$$f(y,t) = \frac{K(t+t_0)}{\sqrt{a(t)}} R(\alpha), \quad (5.25)$$

onde $\alpha = y/a(t)$ e $R(\alpha)$ é uma função de distribuição de discordâncias. Substituindo a expressão 5.25 em 5.24, encontra-se que:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} = \frac{K(t+t_0)}{4\sqrt{\pi a}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)\sqrt{a}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \left(\sqrt{u} + \frac{8\alpha^{3/2} a^{3/2} u^2}{(a\alpha+u)^3} \right) \frac{K(t+t_0) \cdot R(\alpha)}{(a\alpha-u)} du \right] \quad (5.26)$$

ou;

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{K(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)\sqrt{\alpha}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \left(\sqrt{u} + \frac{8\alpha^{3/2} a^{3/2} u^2}{(a\alpha+u)^3} \right) \frac{R(\alpha)}{(a\alpha-u)\sqrt{a}} du \right], \quad (5.27)$$

onde $\alpha = u/a$. Então faz-se $u = a\alpha$ e $du = a d\alpha$ e substitui-se na equação 5.27, e na seqüência renomeia a variável α por u . Portanto, a substituição na equação 5.27 fica $u = au$ e $du = adu$, e a equação obtida é:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{K(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)\sqrt{\alpha}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \left(\sqrt{au} + \frac{8\alpha^{3/2} a^{3/2} a^2 u^2}{(a\alpha + au)^3} \right) \frac{.R(u)}{(a\alpha - au)\sqrt{a}} du \right]. \quad (5.28)$$

Fazendo manipulações algébricas na equação 5.28, é possível chegar na equação integral singular para a trinca sob o modo I de carregamento, dada por:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{K(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)\sqrt{\alpha}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \left(1 + \frac{8.(\alpha.u)^{3/2}}{(\alpha+u)^3} \right) \frac{\sqrt{u}.R(u)}{(\alpha-u)} du \right] = D, \quad (5.29)$$

onde $\alpha_c = e/a$ e D é uma constante arbitrária. O termo da esquerda representa a evolução temporal do tamanho da zona plástica, enquanto que o termo da direita é similar ao caso de um empilhamento estático de discordâncias na ponta da trinca carregada por um fator de intensidade de tensão aplicada e sob o equilíbrio de uma tensão de fricção. Este problema foi tratado por *Chen & Takezono* em 1995 [43] e *Chen & Kitaoka* em 1999 [44], mas em ambos os trabalhos, o termo da tensão de interação é dado pela interação entre discordâncias sem a presença da trinca. A equação 5.29 possui a vantagem de considerar a interação entre discordâncias na presença da trinca, e a desvantagem é que ela é de difícil resolução.

5.2.2 Modelo analítico segundo o modelo CK

A discordância situada em uma posição y a frente da trinca experimenta uma tensão total de cisalhamento dada por [43,44]:

$$\sigma_{xy} = \frac{\dot{K}(t+t_0)}{4\sqrt{\pi y_i}} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_e^a \frac{f(y_j, t)}{y_i - y_j} dy_j, \quad (5.30)$$

onde y_i e y_j são as posições da i -ésima e j -ésima discordâncias respectivamente e σ_{xy} é a tensão total de cisalhamento no modo I. Combinando as equações 5.3, 5.30 e 5.7; tem-se que:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{1}{f(y,t)} \frac{d}{dt} \int_y^{a(t)} f(y,t) dy \right)^{1/m} = \frac{\dot{K}(t+t_0)}{4\sqrt{\pi y}} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_e^a \frac{f(u,t)}{y-u} du. \quad (5.31)$$

Assumindo que a velocidade das discordâncias na zona plástica é constante e igual a da/dt , obtêm-se:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} = \frac{\dot{K}(t+t_0)}{4\sqrt{\pi y}} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_e^a \frac{f(u,t)}{y-u} du. \quad (5.32)$$

É assumido que para resolver a equação 5.32, a função distribuição de discordâncias ou função de densidade de discordâncias $f(y,t)$ pode ser escrita como:

$$f(y,t) = \frac{\dot{K}(t+t_0)}{\sqrt{a(t)}} R(\alpha), \quad (5.33)$$

onde $\alpha = y/a(t)$ e $R(\alpha)$ é uma função de distribuição de discordâncias. Substituindo a expressão 5.33 em 5.32, encontra-se que:

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K}(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_{\alpha_c}^1 \frac{R(u)}{\alpha-u} du = I, \quad (5.34)$$

onde $\alpha_c = e/a$ e I é uma constante arbitrária. A equação 5.34 também pode ser resolvida usando o método do teorema da inversão desenvolvido por *Muskhelishvili* [54] e descrito por *Head & Louat* [61]. É assumido que $R(\alpha_c) = R(1) = 0$ e então a função $R(\alpha)$ é dada por:

$$R(\alpha) = \frac{1}{\pi i} \sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)} \int_{\alpha_c}^1 \frac{1/\pi i \left(I - 1/4\sqrt{u\pi} \right) \frac{2\pi(1-\nu)}{\mu b}}{\sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha}, \quad (5.35)$$

onde i é o número complexo.

Para que a equação 5.35 seja válida, a condição apresentada a seguir deve ser satisfeita:

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{I - 1/4\sqrt{u\pi}}{\sqrt{(1-\alpha)(\alpha-\alpha_c)}} \cdot du = 0. \quad (5.36)$$

As soluções para as equações 5.35 e 5.36, conforme *Byrd & Friedman* [62] e *Gradshteyn & Ryzhik* [63], são dadas por:

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} \equiv 0, \quad (5.37)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{u(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot \frac{du}{u-\alpha} = \frac{2}{(1-\alpha)} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c-1}{1-\alpha}, k\right), \quad (5.38)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{u(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot du = 2 \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right), \quad (5.39)$$

$$\int_{\alpha_c}^1 \frac{1}{\sqrt{(1-u)(u-\alpha_c)}} \cdot du = \pi, \quad (5.40)$$

onde $k = \sqrt{1-\alpha_c}$ é o módulo das integrais elípticas completas, $E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ e $\Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c-1}{1-\alpha}, k\right)$ são as integrais elípticas completas de primeira e terceira classe respectivamente.

Para resolver a equação 5.35, as equações 5.37 e 5.38 serão utilizadas, o que resulta em:

$$R(\alpha) = -\frac{(1-\nu)}{\pi^{3/2}\mu b} \cdot \sqrt{\frac{\alpha-\alpha_c}{1-\alpha}} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c-1}{1-\alpha}, k\right). \quad (5.41)$$

A constante I é determinada da equação 5.36, com o uso das equações 5.39 e 5.40, o que resulta em:

$$I = \frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{2\pi^{3/2}}. \quad (5.42)$$

5.3. EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA OS MODOS DE FRATURA

5.3.1 O tamanho da zona plástica

Os lados esquerdos das equações 5.11, 5.29 e 5.34 são equações diferenciais de 1ª ordem, e podem ser resolvidas analiticamente;

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t + t_0)} = C, \quad (5.43)$$

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t + t_0)} = D, \quad (5.44)$$

$$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t + t_0)} = I. \quad (5.45)$$

A equação 5.43 representa a evolução temporal da zona plástica para os modos II e III, enquanto que as equações 5.44 e 5.45 para o modo I.

O que muda nas equações são as constantes arbitrárias C , D e I determinadas nos itens 5.1 e 5.2. Então, trabalhar-se apenas na resolução somente da equação 5.43 porque os resultados das três equações são os mesmos, a menos dessas constantes. Reagrupando a expressão, obtêm-se:

$$\frac{da}{dt} \cdot \frac{a^{m/2}}{\dot{K}^m \cdot (t + t_0)^m} = C^m \cdot V_0 \quad (5.46)$$

ou;

$$\int_e^a a^{m/2} \cdot da = C^m \cdot V_0 \cdot \dot{K}^m \cdot \int_{t_0}^t (t + t_0)^m \cdot dt. \quad (5.47)$$

Fazendo a integração, a equação para a evolução temporal da zona plástica para os modos II e III segundo o modelo HRS, é dada por:

$$a = \left(C_a \cdot V_0 \cdot \dot{K}^m \cdot \left((t + t_0)^{m+1} - t_0^{m+1} \right) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}, \quad (5.48)$$

onde $C_a = \left(\frac{m+2}{m+1} \right) \cdot \frac{\pi^{m/2}}{2^{\frac{3m+2}{2}}} \cdot \left(\frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right)^m$ e m é o expoente da tensão. Para o modo I, as

equações obtidas para a evolução temporal da zona plástica segundo os modelos HRS e CK respectivamente, são dadas por:

$$a = \left(D_a \cdot V_0 \cdot \left(D \cdot \dot{K} \right)^m \cdot \left((t + t_0)^{m+1} - t_0^{m+1} \right) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}, \quad (5.49)$$

$$a = \left(I_a \cdot V_0 \cdot \dot{K}^m \cdot \left((t + t_0)^{m+1} - t_0^{m+1} \right) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}, \quad (5.50)$$

$$\text{onde } D_a = \frac{(m+2)}{2 \cdot (m+1)} \text{ e } I_a = \frac{(m+2)}{2 \cdot (m+1)} \cdot \left(\frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{2\pi^{3/2}} \right)^m.$$

5.3.2 A tensão ao longo da zona plástica

Assim como a evolução temporal da zona plástica, as tensões nas discordâncias também são dadas pelos primeiros termos das equações 5.11, 5.29 e 5.34, através das equações:

$$\frac{\sigma \cdot \sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t + t_0)} = C, \quad (5.51)$$

$$\frac{\sigma \cdot \sqrt{a}}{K \cdot (t + t_0)} = D, \quad (5.52)$$

$$\frac{\sigma \cdot \sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t + t_0)} = I, \quad (5.53)$$

onde $C = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}$, $I = \frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{2\pi^{3/2}}$ e D pode ser determinada na simulação

numérica. Substituindo essas constantes nas equações 5.51 a 5.53, expressões para a evolução temporal das tensões nas discordâncias ao longo da zona plástica, são obtidas e dadas por:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t + t_0)}{\sqrt{a}}, \quad (5.54)$$

$$\sigma = D \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t + t_0)}{\sqrt{a}}, \quad (5.55)$$

$$\sigma = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t + t_0)}{\sqrt{a}}, \quad (5.56)$$

onde a expressão 5.54 é para os modos II e III segundo o modelo HRS. A expressão 5.55 é para o modo I segundo o modelo HRS e 5.56 também é para o modo I, mas segundo o modelo CK.

5.3.3 O número total de discordâncias

O número total n de discordâncias emitidas da fonte e presentes dentro da zona plástica é dado por [16,42-45]:

$$n = \int_e^a f(x, t) \cdot dx = \dot{K} \cdot (t + t_0) \cdot \sqrt{a} \cdot \int_{\alpha_c}^1 R(\alpha) \cdot d\alpha, \quad (5.57)$$

onde a é o tamanho da zona plástica, e é o tamanho da zona livre de discordâncias, $f(x, t)$ é a função de densidade de discordâncias, \dot{K} é a taxa do fator de intensidade de tensão aplicada em um dado tempo t e t_0 é um tempo inicial.

A função $R(\alpha)$ para os modos II e III dada pela equação 5.19, pode ser reescrita como [61]:

$$R(\alpha) = \frac{2 \cdot \xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \left(F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot E(A, k) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot F(A, k) \right), \quad (5.58)$$

onde ξ é igual a 1 para o modo III e igual a $(1-\nu)$ para o modo II, $F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ e $E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$ são as integrais elípticas completas de 1ª e 2ª classes, $F(A, k)$ e $E(A, k)$ são as integrais elípticas incompletas de 1ª e 2ª classes, $A = \text{sen}^{-1}\left(\sqrt{\frac{\alpha - \alpha_c}{\alpha \cdot (1 - \alpha_c)}}\right)$ é o argumento das integrais elípticas incompletas, $k = \sqrt{1 - \alpha_c}$ é o módulo das integrais elípticas, $\alpha_c = e/a$ e $\alpha = x/a(t)$.

Portanto, substituindo a equação 5.58 em 5.57 e fazendo a integração, o número total de discordâncias, segundo o modelo HRS para os modos II e III, é [39,62]:

$$n = \frac{2 \cdot \xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{a} \cdot \alpha_c \cdot \dot{K} \cdot (t + t_0) \cdot \frac{F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \left(\frac{E^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{1}{\alpha_c} - 1 \right), \quad (5.59)$$

onde as variáveis acima já foram definidas. Esta expressão permite o cálculo do número total de discordâncias dentro da zona plástica.

A função $R(\alpha)$ para o modo I dada pela equação 5.41, pode ser reescrita como [44,62,63]:

$$R(\alpha) = \frac{(1-\nu)}{\mu b \pi^{3/2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \cdot \left(F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot E(A, k) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot F(A, k) \right), \quad (5.60)$$

onde $A = \text{sen}^{-1}\left(\sqrt{\frac{1 - \alpha}{1 - \alpha_c}}\right)$ é argumento das integrais elípticas incompletas e $\alpha = y/a(t)$.

Da mesma forma como feito anteriormente, substituindo a equação 5.60 em 5.57 e fazendo a integração, o número total de discordâncias é [44,62,63]:

$$n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{a} \cdot \dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \left[1 - \frac{k^2}{2} - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right]. \quad (5.61)$$

Esta expressão permite o cálculo do número total de discordâncias dentro da zona plástica para o modo I, segundo o modelo CK.

5.3.4 O fator de intensidade de tensão efetivo local

O fator de intensidade de tensão K_S devido ao efeito de blindagem de discordâncias causado pelo empilhamento de discordâncias no ponto Z, localizado entre as duas fontes de discordâncias, conforme a figura 5.1, para os modos II e III segundo o modelo HRS, é dado por [11,45,46]:

$$K_S = \int_{d_c}^a \frac{\mu b}{\xi \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \frac{f(x,t)}{\sqrt{x}} \cdot dx = \frac{\mu b}{\xi \sqrt{2\pi}} \cdot \dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \int_{\alpha_d}^1 \frac{R(\alpha)}{\sqrt{\alpha}} \cdot d\alpha, \quad (5.62)$$

onde $\alpha_d = d_c/a$ e d_c é uma distância em que os segmentos de discordâncias em laços viajam numa mesma velocidade e são cancelados.

Substituindo a equação 5.58 em 5.62 obtemos [62]:

$$K_S = -\dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \frac{2\sqrt{\alpha_c}}{\pi} \cdot \left(\left(\frac{\pi}{2} - A_d \right) \cdot \frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} + \frac{L_k}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 A_d}} - \frac{L_d}{\sqrt{\alpha_c}} \right), \quad (5.63)$$

onde, algumas das variáveis da expressão acima são definidas por:

$$A_d = \sin^{-1} \left(\sqrt{\frac{\alpha_d - \alpha_c}{\alpha_d \cdot (1 - \alpha_c)}} \right), \quad (5.64)$$

$$L_k = E(A_d, k) \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) - F(A_d, k) \cdot E\left(\frac{\pi}{2}, k\right), \quad (5.65)$$

$$L_d = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{\alpha_d - \alpha_c}{1 - \alpha_d}}\right), \quad (5.66)$$

onde A_d é o argumento das integrais elípticas incompletas devido a blindagem.

O fator de intensidade de tensão K_S devido ao efeito de blindagem de discordâncias, para o modo I segundo o modelo CK, é dado por [43,44]:

$$K_S = \int_{a_c}^a \frac{3\mu b}{4(1-\nu)\sqrt{\pi}} \cdot \frac{f(y,t)}{\sqrt{y}} \cdot dy = \frac{3\mu b}{4(1-\nu)\sqrt{\pi}} \cdot \dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \int_{\alpha_d}^1 \frac{R(\alpha)}{\sqrt{\alpha}} \cdot d\alpha. \quad (5.67)$$

Substituindo a equação 5.60 em 5.67 e assumindo que $\alpha_d \cong \alpha_c$ obtemos [61]:

$$K_S = \dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \frac{3}{2\pi^2} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \left[\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \right]. \quad (5.68)$$

O fator de intensidade de tensão efetivo local K_e na ponta da trinca é dado por [11,43-46]:

$$K_e = K - K_S, \quad (5.69)$$

onde K é o fator de intensidade de tensão aplicada.

5.4. EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA A TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL SUAVE

Quando o tempo t_0 é pequeno comparado com o tempo t , ou seja, as fontes de discordâncias são formadas em baixos valores de K_0 e $K \gg K_0$. Assim sendo, o tamanho da zona plástica a é grande quando comparado com o tamanho da zona livre de discordâncias e , e então $\alpha_c \ll 1$ e também é assumido que $\alpha_c \cong \alpha_d$. Neste caso, $k \approx 1$ e as expressões deduzidas no item 5.3 são simplificadas, e expressões analíticas são obtidas. Para isso, as relações de *Byrd & Friedman* [62] são utilizadas:

$$F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \approx \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right), \quad (5.70)$$

$$E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \approx 1. \quad (5.71)$$

As expressões 5.48, 5.54, 5.59 e 5.69 ficam reduzidas respectivamente, para os modos II e III segundo o modelo HRS, em função do fator de intensidade de tensão aplicada K :

$$a = \left(\frac{C_a \cdot V_0}{\dot{K}}\right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad (5.72)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{C_a \cdot V_0}\right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad (5.73)$$

$$n = \frac{2 \cdot \xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{C_a \cdot V_0}{\dot{K}}\right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}}, \quad (5.74)$$

$$K_e = \sqrt{e} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{C_a \cdot V_0}\right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}} \cdot \ln\left(4 \cdot \sqrt{\frac{a}{e}}\right), \quad (5.75)$$

onde $\xi = 1$ para o modo III e $\xi = (1 - \nu)$ para o modo II. De modo análogo, para o modo I as expressões 5.49 e 5.55 segundo o modelo HRS:

$$a = D^{\frac{2m}{m+2}} \cdot \left(\frac{D_a \cdot V_0}{\dot{K}}\right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad (5.76)$$

$$\sigma = D^{\frac{2m}{m+2}} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{D_a \cdot V_0}\right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}. \quad (5.77)$$

As equações 5.72 a 5.75 serão confrontadas com simulações numéricas no capítulo 6, com o objetivo de verificar a eficiência do modelo analítico dinâmico (segundo o modelo HRS) desenvolvido aqui, para os modos II e III. Já as equações 5.76 e 5.77, ficaram em função da constante arbitrária D da equação 5.29, e esta constante pode ser determinada via simulação numérica para o modo I. A equação 5.29 é uma equação integral singular de difícil resolução, e neste trabalho, não foi possível obter a solução completa deste tipo de equação. Somente a parte temporal que é composta de uma equação diferencial de primeira ordem foi resolvida.

O modelo analítico dinâmico para o modo I, segundo o modelo CK foi desenvolvido. De modo análogo ao que foi realizado anteriormente, as expressões 5.50, 5.56, 5.61 e 5.69 ficam:

$$a = \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad (5.78)$$

$$\sigma = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \ln \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) \cdot \left(\frac{\dot{K}}{I_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad (5.79)$$

$$n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \ln \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) - 1 \right) \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}}, \quad (5.80)$$

$$K_e = \left(1 - \frac{3}{4\pi^2} \cdot \ln^2 \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) + \frac{3}{2\pi^2} \cdot \ln \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) \right) \cdot K. \quad (5.81)$$

As equações 5.78 a 5.81 serão confrontadas com simulações numéricas no capítulo 6, com o objetivo de verificar a eficiência do modelo analítico dinâmico (segundo o modelo CK) desenvolvido aqui para o modo I.

5.5. RESUMO DOS MODELOS DESENVOLVIDOS NESTE TRABALHO

As tabelas 5.1 a 5.3 apresentam, respectivamente, de forma resumida as premissas, as equações integrais singulares e suas correspondentes soluções, as constantes de integração e as expressões analíticas obtidas dos modelos da transição frágil-dúctil.

Modelo	Premissas	Equação integral singular e sua solução
modos II e III segundo o modelo HRS	trinca infinita; modelo analítico dinâmico; interação discordância-discordância na presença da trinca.	$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K} \cdot (t+t_0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{2\pi\xi\sqrt{\alpha}} \int_{\alpha_c}^1 \frac{\sqrt{u}R(u)}{\alpha-u} du = C$ $R(\alpha) = -\frac{4\xi C}{\mu b \pi} \alpha_c \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c(1-\alpha_c)}{\alpha-\alpha_c}, k\right)$ $C = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}$
modo I segundo o modelo HRS	trinca infinita; modelo analítico dinâmico; interação discordância-discordância na presença da trinca.	$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K}(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)\sqrt{\alpha}} \left[\int_{\alpha_c}^1 \left(1 + \frac{8(\alpha u)^{3/2}}{(\alpha+u)^3} \right) \frac{\sqrt{u} \cdot R(u)}{(\alpha-u)} du \right] = D$
modo I segundo o modelo CK	trinca infinita; modelo analítico dinâmico; interação discordância-discordância sem a presença da trinca.	$\frac{1}{V_0^{1/m}} \left(\frac{da}{dt} \right)^{1/m} \frac{\sqrt{a}}{\dot{K}(t+t_0)} = \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \int_{\alpha_c}^1 \frac{R(u)}{\alpha-u} du = I$ $R(\alpha) = -\frac{(1-\nu)}{\pi^{3/2} \mu b} \sqrt{\frac{\alpha-\alpha_c}{1-\alpha}} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c-1}{1-\alpha}, k\right)$ $I = \frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{2\pi^{3/2}}$

Tabela 5.1 – Resumo dos modelos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.

Modelo	Tamanho da zona plástica	Tensão ao longo da zona plástica
modos II e III segundo o modelo HRS	$a = \left(C_a \cdot V_0 \cdot \dot{K}^m \cdot ((t+t_0)^{m+1} - t_0^{m+1}) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}$ $C_a = \left(\frac{m+2}{m+1} \right) \cdot \frac{\pi^{\frac{m}{2}}}{2^{\frac{3m+2}{2}}} \cdot \left(\frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right)^m$ $a = \left(\frac{C_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$	$\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t+t_0)}{\sqrt{a}}$ $\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{C_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$
modo I segundo o modelo HRS	$a = \left(D_a \cdot V_0 \cdot (D \cdot \dot{K})^m \cdot ((t+t_0)^{m+1} - t_0^{m+1}) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}$ $D_a = \frac{(m+2)}{2 \cdot (m+1)}$ $a = D^{\frac{2m}{m+2}} \cdot \left(\frac{D_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$	$\sigma = D \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t+t_0)}{\sqrt{a}}$ $\sigma = D^{\frac{2m}{m+2}} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{D_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$
modo I segundo o modelo CK	$a = \left(I_a \cdot V_0 \cdot \dot{K}^m \cdot ((t+t_0)^{m+1} - t_0^{m+1}) + e^{\frac{m+2}{2}} \right)^{\frac{2}{m+2}}$ $I_a = \frac{(m+2)}{2 \cdot (m+1)} \cdot \left(\frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{2\pi^{\frac{3}{2}}}\right)^m$ $a = \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$	$\sigma = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \cdot \frac{\dot{K} \cdot (t+t_0)}{\sqrt{a}}$ $\sigma = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) \cdot \left(\frac{\dot{K}}{I_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad \text{limite de } a \gg e.$

Tabela 5.2 – Equações do tamanho e da tensão ao longo da plástica obtidas dos modelos analíticos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.

Modelo	Número de discordâncias	Fator de intensidade de tensão efetivo local
modos II e III segundo o modelo HRS	$n = \frac{2\xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \sqrt{a} \alpha_c \dot{K} (t+t_0) \cdot \frac{F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \left(\frac{E^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{1}{F^2\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \cdot \frac{1}{\alpha_c} - 1 \right)}{1}$ $n = \frac{2\xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{C_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}},$ <p style="text-align: center;"><i>limite de $a \gg e$.</i></p>	$K_S = -\dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \frac{2\sqrt{\alpha_c}}{\pi} \cdot \left(\frac{\pi}{2} - A_d \right) \cdot \frac{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} + \frac{L_k}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 A_d}} - \frac{L_d}{\sqrt{\alpha_c}}$ $K_e = K - K_S$ $K_e = \sqrt{e} \cdot \left(\frac{\dot{K}}{C_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}} \cdot \ln \left(4 \sqrt{\frac{a}{e}} \right),$ <p style="text-align: center;"><i>limite de $a \gg e$ assumindo que $\alpha_d \cong \alpha_c$.</i></p>
modo I segundo o modelo CK	$n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \sqrt{a} \dot{K} (t+t_0) \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \left[1 - \frac{k^2}{2} \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right]$ $n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \ln \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) - 1 \right) \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}},$ <p style="text-align: center;"><i>limite de $a \gg e$.</i></p>	$K_S = \dot{K} \cdot (t+t_0) \cdot \frac{3}{2\pi^2} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \left[\left(1 - \frac{k^2}{2} \right) F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) \right]$ $K_e = K - K_S$ $K_e = \left(1 - \frac{3}{4\pi^2} \cdot \ln^2 \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) + \frac{3}{2\pi^2} \cdot \ln \left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}} \right) \right) \cdot K,$ <p style="text-align: center;"><i>limite de $a \gg e$ assumindo que $\alpha_d \cong \alpha_c$.</i></p>

Tabela 5.3 – Equações do número de discordâncias e do fator de intensidade de tensão efetivo local obtidas dos modelos analíticos da transição frágil-dúctil desenvolvidos neste trabalho.

CAPÍTULO 6

COMPARAÇÕES ENTRE SIMULAÇÕES NUMÉRICAS E MODELOS ANALÍTICOS

Neste capítulo, comparações entre simulações numéricas (capítulo 4) e modelos analíticos estáticos e dinâmicos (capítulos 3 e 5) serão realizadas e discutidas. Nos modelos analíticos estáticos, as discordâncias estão em equilíbrio dentro da zona plástica sob a ação de uma tensão de atrito σ_f . Assumindo nas simulações numéricas (caso dinâmico) que a tensão ao longo da zona plástica σ é constante, é sugerido e verificado como o elo de ligação entre os modelos estáticos e dinâmicos que a tensão de atrito dos modelos estáticos é equivalente à tensão ao longo da zona plástica nos modelos dinâmicos e simulações numéricas ($\sigma_f = \sigma$). Desta forma, os modelos analíticos dinâmicos (capítulo 5) podem ser confrontados com os modelos analíticos estáticos. Os tópicos que compreendem esse capítulo são:

1. Comparações entre a simulação numérica HRS, o modelo analítico estático e simulação numérica CK e o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo CK) para o modo I;
2. Comparações entre a simulação numérica HRS, os modelos analíticos estáticos MB e CO e o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo HRS) para o modo III;
3. Comparações entre a simulação numérica HRS, o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo o HRS) para os modos II e III;
4. Simulações numéricas HRS para o modo I.

6.1. COMPARAÇÕES PARA O MODO I

Simulações numéricas para uma trinca carregada em modo I foram realizadas de maneira análoga nos modelos HRS e analítico estático CK. A tensão de cisalhamento σ_{xy} em qualquer discordância em cunha posicionada a uma distância y_i emitida da ponta da trinca, como mostrado na figura 4.1 (a), no modelo CK, é dada pela equação abaixo [43,44]:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \frac{1}{(y_i - y_j)}, \quad (6.1)$$

onde as variáveis e as constantes desta já foram definidas no capítulo 4. Observe que a única diferença no procedimento de simulação é entre o 3º termo das equações 6.1 e 4.1, que correspondente à interação discordância–discordância. O termo da tensão de interação é agora aproximado para o caso em que as interações devido à presença da trinca são desconsideradas.

Desta forma, como resultado do procedimento descrito acima, gráficos análogos aos apresentados nas figuras 4.3 podem ser obtidos. Como o objetivo deste tópico é a comparação entre a simulação numérica e o modelo analítico estático CK, as equações 3.16 e 3.15 serão usadas [43,44]:

$$n = \frac{2\pi a(1-\nu)\sigma_f}{\mu b} \left[\left(1 - \frac{k^2}{2}\right) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} \right], \quad (6.2)$$

$$\pi\sigma_f - \frac{K_e \sin \theta \cos \frac{1}{2}\theta}{\sqrt{2\pi a}} \times F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = 0. \quad (6.3)$$

Será assumido nestas duas expressões que o tamanho da zona plástica a é grande quando comparado com o tamanho da zona livre de discordâncias e . Neste caso, $k \approx 1$, $\theta = \pi/2$ e as expressões ficam simplificadas, de modo que expressões analíticas são

obtidas para a comparação. Para isso, as relações 5.70 e 5.71 de *Byrd & Friedman* [62] são utilizadas. Após alguma manipulação algébrica, é deduzido que:

$$n = \frac{2\pi \cdot a \cdot (1-\nu)}{\mu \cdot b} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\ln\left(4\sqrt{\frac{a}{e}}\right)} \right] \cdot \sigma_f, \quad (6.4)$$

$$K_e = 2\pi^{3/2} \cdot \sqrt{a} \cdot \frac{1}{\ln\left(4\sqrt{\frac{a}{e}}\right)} \cdot \sigma_f. \quad (6.5)$$

No capítulo 5 foi desenvolvido um modelo analítico dinâmico para o modo I segundo o modelo CK. Serão usadas, deste modelo desenvolvido, as equações para uma transição frágil-dúctil suave que foram deduzidas no tópico 5.4. O tamanho da zona plástica (equação 5.78), a tensão ao longo da zona plástica (equação 5.79), o número de discordâncias (equação 5.80) e o fator de intensidade de tensão efetivo local (equação 5.81) são dados respectivamente por:

$$a = \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad (6.6)$$

$$\sigma = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) \cdot \left(\frac{\dot{K}}{I_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad (6.7)$$

$$n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) - 1 \right) \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}}, \quad (6.8)$$

$$K_e = \left(1 - \frac{3}{4\pi^2} \cdot \ln^2\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) + \frac{3}{2\pi^2} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) \right) \cdot K. \quad (6.9)$$

Para comparar as expressões 6.4 e 6.5 do modelo analítico estático CK com o modelo analítico dinâmico deste trabalho (segundo o modelo CK), serão usadas as

expressões 6.7 e 6.8 para obter a expressão do número de discordâncias em função da tensão ao longo da zona plástica, que é dada por:

$$n = \frac{(1-\nu)}{\mu b \sqrt{\pi}} \cdot \left(2\pi^{3/2}\right)^{2m+3} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) - 1\right) \cdot \left(\frac{1}{\ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right)}\right)^{2m+3} \cdot \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}}\right)^{\frac{2m+4}{m+2}} \cdot \sigma^{2m+3}. \quad (6.10)$$

Combinando as expressões 6.7 e 6.9, obtém-se a expressão do fator de intensidade tensão efetivo local em função da tensão ao longo da zona plástica, que é dada por:

$$K_e = \left(2\pi^{3/2}\right)^{m+2} \cdot \left(\frac{1}{\ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right)}\right)^{m+2} \cdot \left(\frac{I_a \cdot V_0}{\dot{K}}\right) \cdot \eta \cdot \sigma^{m+2}, \quad (6.11)$$

$$\text{onde } \eta = \left(1 - \frac{3}{4\pi^2} \cdot \ln^2\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right) + \frac{3}{2\pi^2} \cdot \ln\left(\frac{4}{\sqrt{\alpha_c}}\right)\right).$$

Agora, com as equações analíticas 6.4, 6.5, 6.10 e 6.11, comparações podem ser efetuadas com a utilização dos dados da simulação numérica. A figura 6.1 (a)-(b) apresenta os gráficos do número de discordâncias n e fator de intensidade de tensão efetivo local K_e em função da tensão ao longo da zona plástica σ . Os dados gerados pela simulação de e , a e σ foram substituídos nas expressões 6.4, 6.5, 6.10 e 6.11 para obter as curvas dos modelos analíticos estático (expressões 6.4 e 6.5) e dinâmico (expressões 6.10 e 6.11).

A figura 6.1 (a) mostra uma boa concordância entre o modelo analítico estático (expressão 6.4) e a simulação numérica, enquanto que o modelo analítico dinâmico (expressão 6.10) também mostra uma boa concordância, diferindo um pouco dos outros dois modelos quando a tensão ao longo da zona plástica eleva-se.

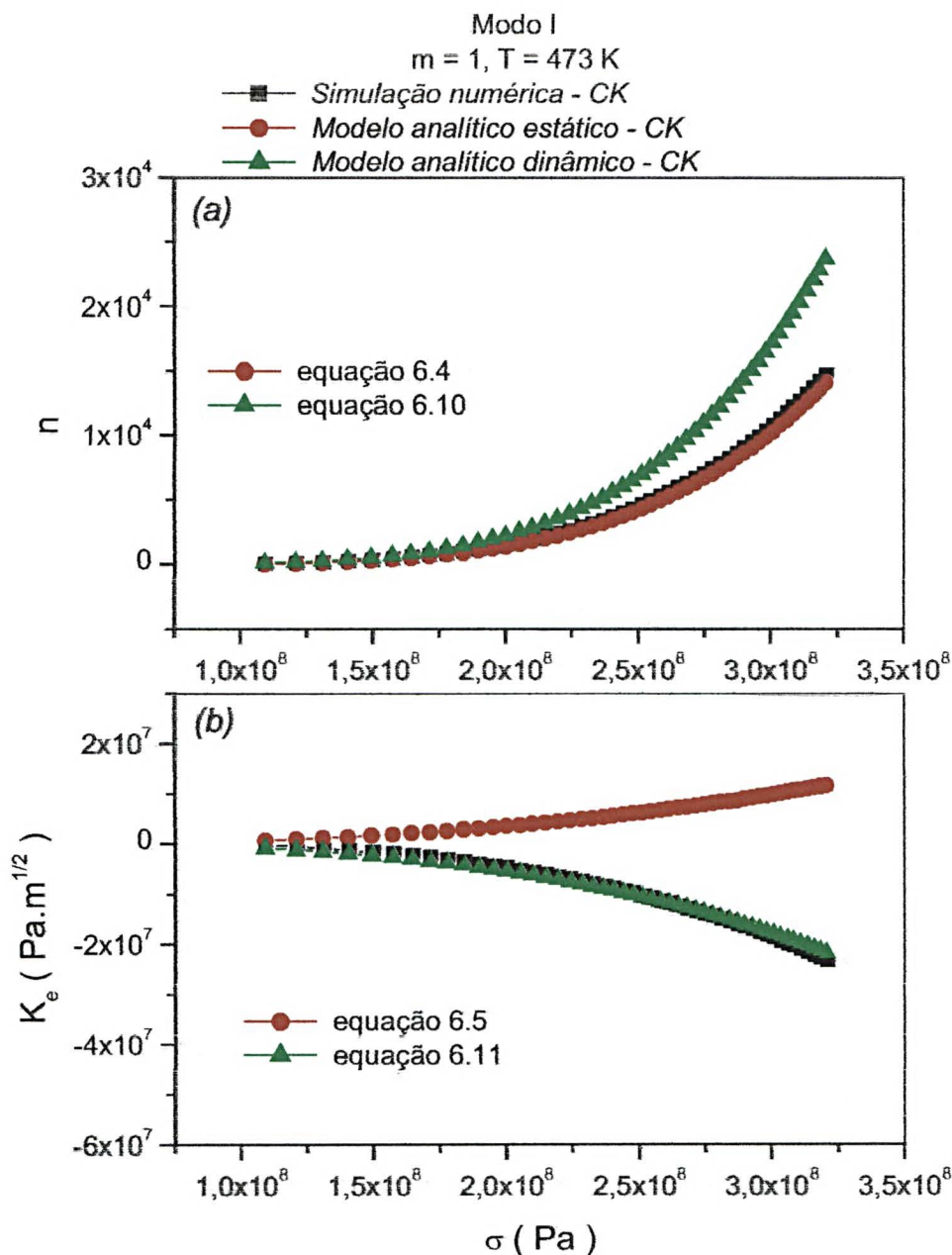


Figura 6.1 – Em (a) gráfico do número de discordância e em (b) o fator de intensidade de tensão efetiva local, ambos em função da tensão ao longo da zona plástica.

A explicação para a discrepância entre os modelos analíticos estático e dinâmico para os valores do número de discordâncias é devido, provavelmente, à tensão ao longo da zona plástica σ que foi assumida ser constante. Na figura 6.1 (b), o modelo analítico dinâmico (expressão 6.11) mostra uma boa concordância com a simulação numérica.

Ambos mostram que o fator de intensidade de tensão efetivo local é negativo, ao contrário do modelo analítico estático (expressão 6.5) que prevê um comportamento crescente para o fator de intensidade de tensão efetivo local.

A função distribuição de discordâncias do modelo analítico CK [44], (equação 3.14) que será novamente apresentada abaixo, também foi alvo de comparação com a simulação numérica HRS.

$$f(y) = \frac{2(1-\nu)\sigma_f}{\mu b} \sqrt{\frac{a}{y}} \left[E(\phi, k) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, k\right)}{F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)} F(\phi, k) \right], \quad (6.12)$$

onde as integrais elípticas incompletas de primeira e segunda classe $F(\phi, k)$ e $E(\phi, k)$ desta equação, foram calculadas via simulação numérica por meio das rotinas de *William et al* [64]. A função distribuição de discordâncias da simulação numérica baseada no modelo HRS, foi calculada pela expressão 4.15, e dada por:

$$f(y) = \frac{1}{y_i - y_{i-1}}. \quad (6.13)$$

A figura 6.2 mostra a comparação entre a simulação numérica e o modelo analítico, por meio de gráfico da função de distribuição de densidade de discordância $f(y)$ em função da posição ao longo do plano de deslizamento y . A primeira observação a ser feita é que as formas apresentadas pelas duas curvas são as mesmas. A oscilação que foi observada no gráfico da figura 4.3 (f), não é observada aqui.

A explicação para este fato é que o agrupamento de discordâncias na zona plástica não foi utilizado no algoritmo. Como uma consequência disso, um tempo menor de simulação numérica foi empregado, e por isso o valor máximo do fator de intensidade de tensão aplicada K possui um valor menor em comparação com outros resultados de simulação deste trabalho.

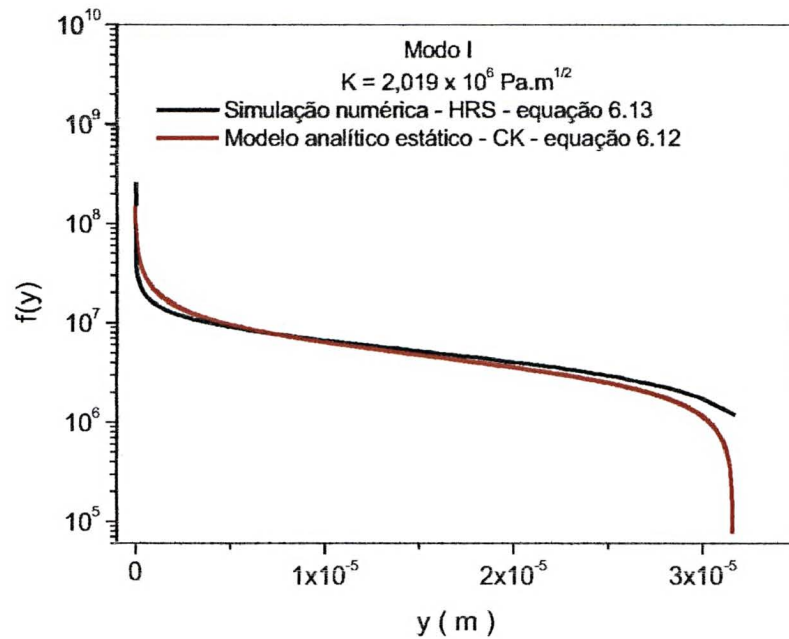


Figura 6.2 – Gráfico da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo do plano de deslizamento.

Os dados gerados pela simulação numérica do gráfico da figura 6.2 e utilizados para calcular dados da expressão 6.12 foram os seguintes:

- $a = 31,6 \mu\text{m}$ tamanho da zona plástica
- $e = 0,021 \mu\text{m}$ tamanho da zona livre de discordâncias
- $\sigma = 92 \text{ MPa}$ tensão ao longo da zona plástica
- $\nu = 0,3$ coeficiente de Poisson
- $\mu = 50 \text{ GPa}$ módulo de cisalhamento
- $b = 4 \overset{\circ}{A}$ vetor de Burgers
- $t = 1764 \text{ s}$ tempo
- $T = 473 \text{ K}$ temperatura
- $\dot{K} = 1,0 \times 10^{-3} \text{ MPa.m}^{1/2}.\text{s}^{-1}$ taxa de carregamento

Foi também observado em algumas simulações numéricas para o modelo analítico estático CK, que aumentando o tamanho da zona livre de discordâncias, o

número de discordâncias terá um valor reduzido ao longo do plano de deslizamento para um valor constante do tamanho da zona plástica.

Agora será descrito descrever um estudo comparativo entre os resultados de simulações numéricas de acordo com o modelo HRS (equação 4.1) e de acordo com o modelo CK (equação 6.1) para o modo I. O procedimento para efetuar as simulações numéricas foi descrito e apresentado no capítulo 4, bem como os parâmetros e as constantes que são fixas em ambos os modelos.

As figuras 6.3 (a)-(b) e 6.4 (a)-(c) apresentam respectivamente os gráficos do tamanho da zona plástica, da tensão ao longo da zona plástica, do tamanho da zona livre de discordâncias, do número de discordâncias e do fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada para o expoente da tensão m igual a 1 e a temperatura T igual a 473 K.

Observa-se pelos gráficos das figuras 6.3 e 6.4 uma grande diferença entre as simulações numéricas de *Hirsch et al* (modelo HRS) em comparação com as de *Chen & Kitaoka* (modelo CK). Essas diferenças estão nos gráficos do tamanho da zona plástica (figura 6.3 (a)), tensão ao longo da zona plástica (figura 6.3 (b)), tamanho da zona livre de discordâncias (figura 6.4 (a)), número de discordâncias (figura 6.4 (b)) e o fator de intensidade de tensão efetivo local (figura 6.4 (c)).

A evolução temporal na dinâmica de geração discordâncias em ambos os modelos é a mesma, mas os resultados são bem diferentes, pois o modelo CK prevê um tamanho de zona plástica bem maior em relação ao modelo HRS. A explicação se deve ao fato de que o termo de interação do modelo CK considera a interação entre as discordâncias na zona plástica, enquanto que no modelo HRS além deste, considera a interação entre discordância-discordância imagem na presença da trinca.

O tamanho da zona livre de discordâncias no modelo CK (figura 6.4 (a)) quase não varia de tamanho em relação ao modelo HRS. A trinca passa a estar fortemente blindada no modelo CK conforme o gráfico da figura 6.4 (c), devido à enorme quantidade de discordâncias emitidas neste modelo (figura 6.4 (b)). Assim, a diferença observada no gráfico da figura 6.1 (b) fica fortemente evidenciada aqui.

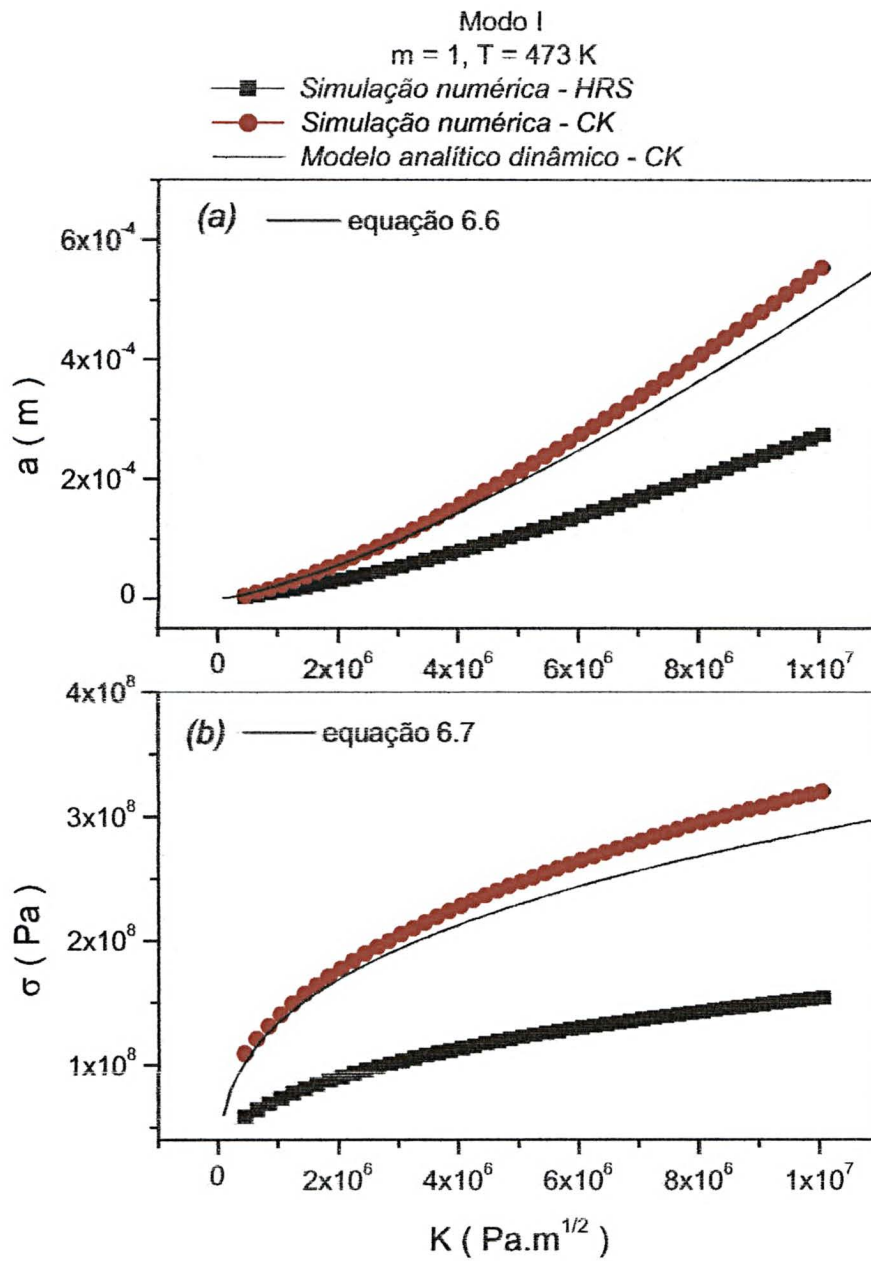


Figura 6.3 – Em (a) gráfico do tamanho da zona plástica e em (b) gráfico da tensão ao longo da zona plástica, ambos em função do fator de intensidade de tensão aplicada para $m = 1$ e $T = 473 \text{ K}$.

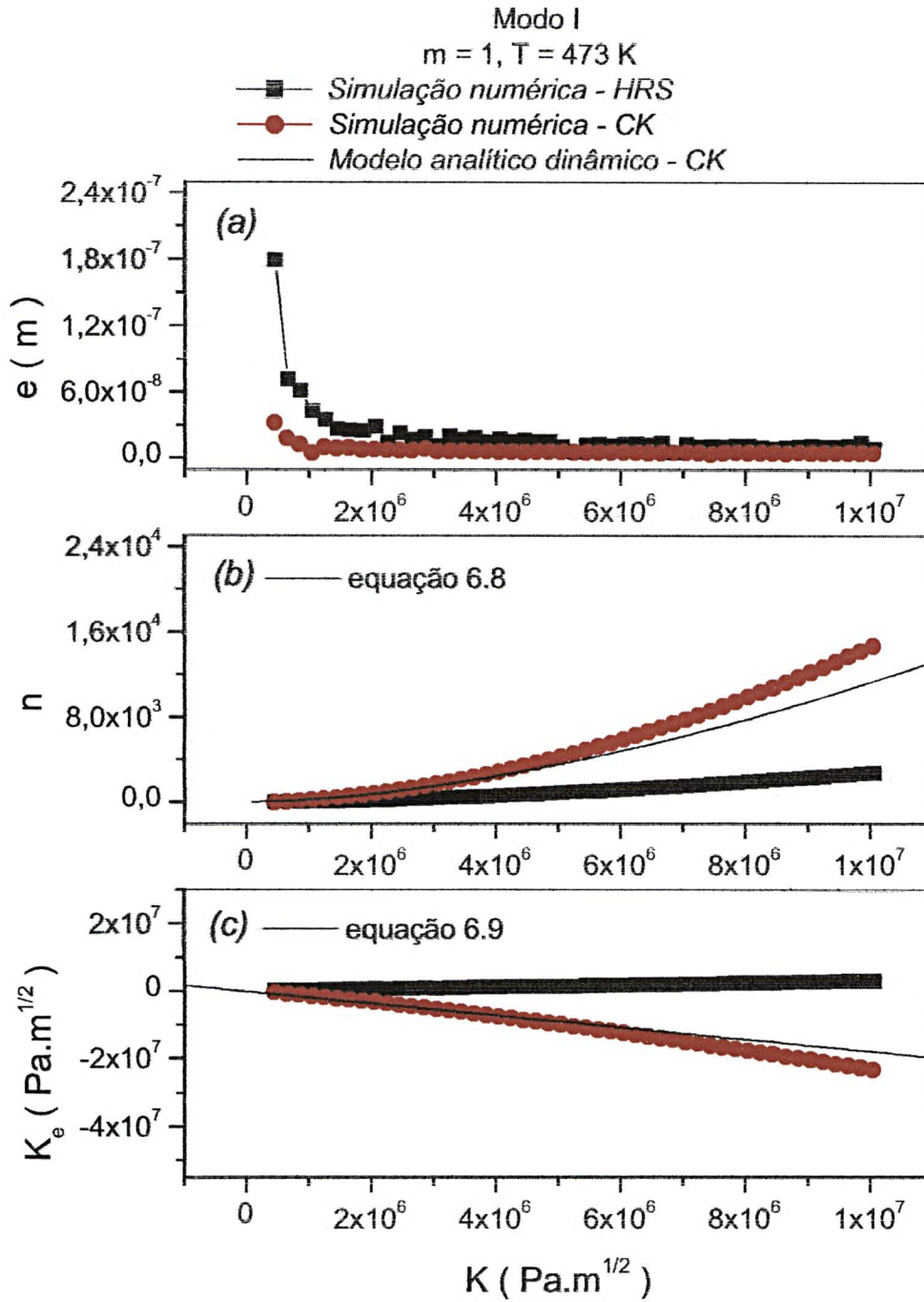


Figura 6.4 – Em (a) tamanho da zona livre de discordâncias, em (b) número de discordâncias e em (c) fator de intensidade de tensão efetivo local, ambos em função do fator de intensidade de tensão aplicada para $m = 1$ e $T = 473 \text{ K}$.

Um outro resultado importante obtido neste trabalho, foi o desenvolvimento do modelo analítico-dinâmico segundo o modelo CK. Este modelo analítico dinâmico é comparado com as simulações numéricas CK nos gráficos das figuras 6.3 e 6.4. As expressões 6.6 a 6.9 apresentam uma boa concordância com as simulações numéricas. Para o tamanho da zona livre de discordâncias não foi possível desenvolver um critério físico que explique o seu comportamento por meio de uma expressão matemática.

Por simulação numérica, foi verificado em estudos preliminares realizados, que quando o expoente da tensão é aumentado de 2 a 5, a diferença entre os modelos CK e HRS é aumentada. A simulação para o modelo CK torna-se bastante complicada devido ao longo tempo necessário para a simulação. É interessante fazer uma verificação em maiores detalhes, futuramente, entre as simulações HRS e CK, além da comparação com o modelo analítico dinâmico segundo o modelo CK para elevados expoentes da tensão. Esse estudo será uma das propostas sugeridas para os trabalhos futuros.

Se voltar ao gráfico da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo do plano de deslizamento apresentado na figura 6.2, será visto que ambos os modelos CK e HRS apresentam uma excelente concordância. Porém, o tempo de simulação numérica para gerar este gráfico foi pequeno, de modo que o fator de intensidade de tensão aplicada possui o valor máximo de $2,0 \times 10^6$ Pa.m^{1/2}. Se analisar o gráfico do número de discordâncias (figura 6.4 (b)), será visto que este valor máximo indica um valor razoavelmente próximo para o número de discordâncias em ambos os modelos.

6.2. COMPARAÇÕES PARA O MODO III

Nesta seção, será apresentado em um estudo comparativo entre os modelos analíticos estáticos de *Majumdar & Burns* (modelo MB) [39] e *Chang & Ohr* (modelo CO) [40,41], por meio das funções de distribuição de densidade de discordâncias. Relembrando do capítulo 3 (equações 3.2 e 3.7), as funções do modelo MB e CO, são dadas, respectivamente, por [39-41]:

$$\frac{f(x)}{\frac{4\sigma_f}{\pi \cdot \mu \cdot b}} = \left[F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) E(\phi, k) - E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) F(\phi, k) \right], \quad (6.14)$$

$$\frac{f(x)}{\frac{4\sigma_f}{\pi \cdot \mu \cdot b}} = F\left(\frac{\pi}{2}, m\right) \left\{ \frac{Q(m^2 - Q^2)^{1/2}}{(1 - Q^2)^{1/2}} - \left(E(D, m) - \frac{E\left(\frac{\pi}{2}, m\right) F(D, m)}{F\left(\frac{\pi}{2}, m\right)} \right) \right\}, \quad (6.15)$$

onde as integrais elípticas incompletas de primeira e segunda classe das equações acima, foram calculadas via simulação numérica.

A figura 6.5 apresenta o gráfico das funções distribuições dadas pelas equações 6.14 e 6.15. Neste gráfico, o tamanho da zona livre de discordância e permaneceu fixo e com valor de $e/c = 0,02$. O tamanho da zona plástica a teve o seu valor variado, conforme mostra a legenda do gráfico.

As curvas da função de distribuição em ambos os modelos possuem os mesmos comportamento e forma. A principal diferença notada nestes modelos é que o modelo MB (em que $c \gg a$) prediz um número mais elevado de discordâncias ao longo da zona plástica se aplicar a expressão 6.13, em relação ao modelo CO (em que $c \cong a$).

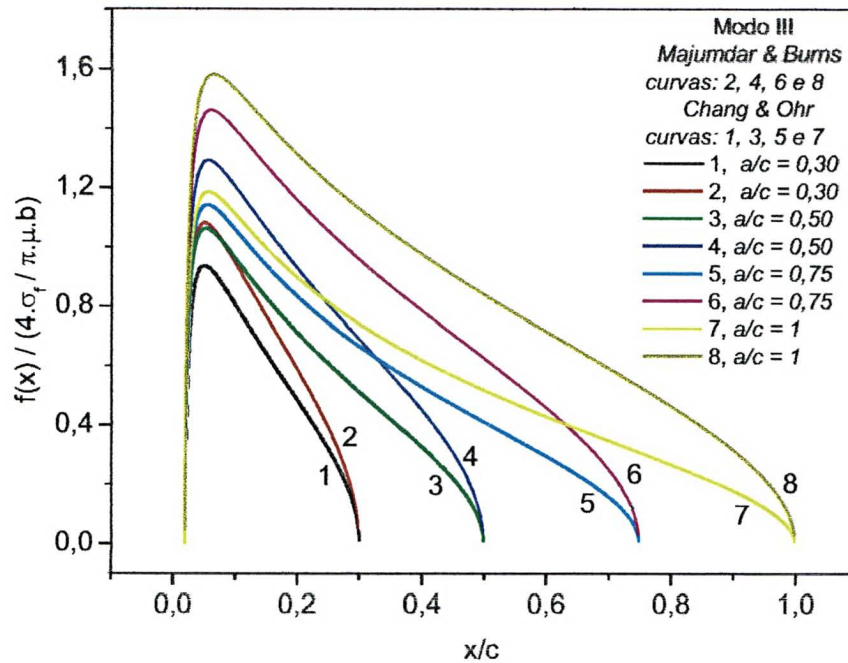


Figura 6.5 – Comparação entre os modelos de Majumdar & Burns e Ohr por meio de gráfico normalizado da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.

A tabela 6.1 apresenta os números de discordâncias presentes na zona plástica calculados pela expressão 3.3, para os modelos MB e CO, obtidos das curvas do gráfico da figura 6.5.

a/c	Modelo MB	Modelo CO
1	833	545
0,75	599	423
0,50	370	286
0,30	194	162

Tabela 6.1 – Número de discordâncias presentes na zona plástica para o modo I de carregamento, referente ao gráfico da figura 6.5.

É observado, nesta tabela, que o modelo MB tende a se aproximar do modelo CO quando $c > a$. Para o caso em que $c = a$, o modelo MB prediz um número mais

elevado de discordâncias dentro da zona plástica, em relação ao modelo CO. Estas diferenças ocorrem porque o modelo CO é aplicado para o caso em que $a \cong c$, enquanto que o modelo MB para o caso em que $c \gg a$.

Na figura 6.6 é apresentado um gráfico das funções de distribuição de densidade de discordâncias dos modelos HRS, MB e CO em função da posição ao longo da zona plástica. A função de distribuição do modelo HRS foi gerada por simulação numérica (equação 4.14), que possui os seguintes dados:

- $a = 1,91 \times 10^{-5}$ m tamanho da zona plástica
- $e = 3,45 \times 10^{-8}$ m tamanho da zona livre de discordâncias
- $\sigma = 1,30 \times 10^8$ Pa tensão ao longo da zona plástica

Os tamanhos da zona plástica e da zona livre de discordâncias descritos acima foram usados para calcular os módulos k e m das integrais elípticas completas e incompletas das expressões 6.14 e 6.15 respectivamente.

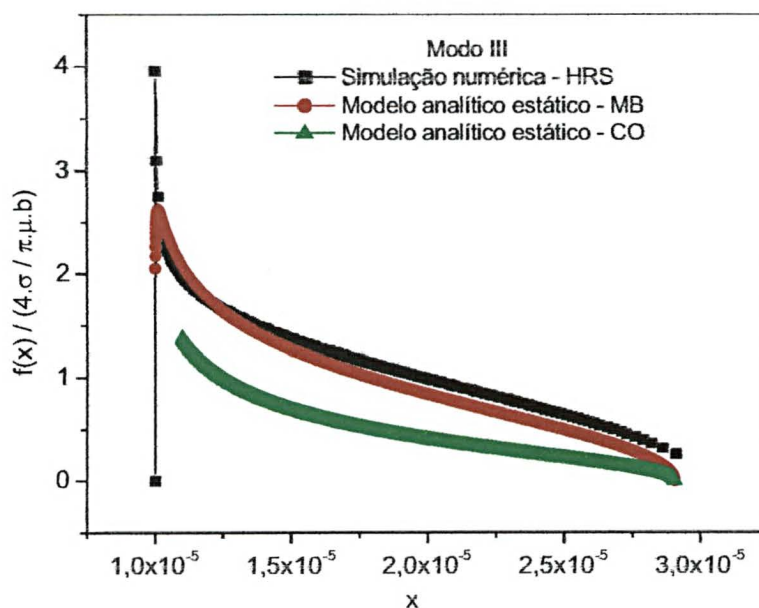


Figura 6.6 – Comparação entre os modelos de Hirsch et al, Majumdar & Burns e Ohr por meio de gráfico normalizado da função de distribuição de densidade de discordâncias em função da posição ao longo da zona plástica.

O que se observa é que o modelo teórico HRS possui comportamento e número total de discordâncias na zona plástica aproximadamente iguais ao modelo analítico

estático MB. O modelo analítico estático CO difere dos modelos HRS e MB. Porém a curva de distribuição deste modelo possui a mesma forma e comportamento, o que está de acordo com o estudo apresentado no gráfico da figura 6.5.

O modelo analítico dinâmico desenvolvido neste trabalho, também é baseado no modelo analítico estático MB, e ambos os modelos possuem comportamentos semelhantes se analisarmos o gráfico da figura 6.6. Por isso, um estudo comparativo entre os modelos analíticos estático CO e dinâmico deste trabalho com o modelo HRS por meio de simulação numérica foi realizado. O fator de intensidade de tensão local efetiva K_e no modelo CO (equação 3.9) é dado por [40,41]:

$$\frac{K_e}{\sigma_f \cdot \sqrt{c}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{(e_1 - c)^{1/2}}{e_1} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, m\right), \quad (6.16)$$

onde e_1 é o tamanho da zona livre de discordâncias, c é o comprimento da trinca e m é o módulo da integral elíptica completa de 1^a classe e definido por:

$$m = \sqrt{\frac{(a_1^2 - e_1^2) \cdot c^2}{(a_1^2 - c^2) \cdot e_1^2}}, \quad (6.17)$$

onde a_1 é o tamanho da zona plástica. O modelo analítico estático CO possui a sua origem exatamente na metade da trinca. Para que a expressão 6.16 possa ser reescrita e comparada com o modelo analítico dinâmico deste trabalho e a simulação numérica HRS, a origem do sistema necessita ser deslocada para a ponta da trinca. Isto é feito substituindo:

$$a_1 = a + c, \quad (6.18)$$

$$e_1 = e + c, \quad (6.19)$$

nas expressões 6.16 e 6.17, onde a e e são o tamanho da zona plástica e o tamanho da zona livre de discordância, respectivamente, medidos a partir da ponta da trinca. Fazendo o limite de $c \rightarrow \infty$, o módulo fica:

$$m = \sqrt{1 - \frac{e}{a}}. \quad (6.20)$$

Substituindo na equação 6.16 $c = 1/c^*$ e expandindo o termo $\frac{(e_1 - c)^{1/2}}{e_1}$ em série em torno de $\bar{c}^* = c$, e fazendo o limite de $c^* \rightarrow 0$, encontra-se a equação para o fator de intensidade de tensão efetivo local do modelo analítico estático CO, dada por:

$$K_e = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{e} \cdot \sigma_f \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, m\right). \quad (6.21)$$

Tomando o limite de $a \gg e$ na expressão acima, conforme *Byrd & Friedman* [62], obtêm-se:

$$K_e = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{e} \cdot \ln\left(4 \cdot \sqrt{\frac{a}{e}}\right) \cdot \sigma, \quad (6.22)$$

onde esta equação relaciona a blindagem com a tensão ao longo da zona plástica. Observe que a tensão de atrito foi substituída pela tensão ao longo da zona plástica, pois este procedimento é utilizado para fazer a ligação entre o modelo analítico estático e dinâmico. Para comparar a expressão 6.22 com o modelo analítico dinâmico desenvolvido no capítulo 5, serão usadas as expressões 5.73 e 5.75 que resulta em:

$$K_e = \frac{2 \cdot \sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{e} \cdot \ln\left(4 \cdot \sqrt{\frac{a}{e}}\right) \cdot \sigma. \quad (6.23)$$

Uma comparação pode ser realizada entre as expressões 6.22 e 6.23. O modelo CO (expressão 6.22) possui um fator de intensidade de tensão efetivo local de cerca de 30% maior em relação ao modelo deste trabalho (expressão 6.23). Este fato é justificado pelo gráfico da figura 6.6, onde no modelo CO, um número menor de discordâncias está presente na zona plástica. Com isso, a trinca sofrerá um menor efeito da blindagem de discordâncias conforme a equação 3.3 do modelo analítico estático MB.

A figura 6.7 apresenta dois gráficos, um do fator de intensidade de tensão efetivo local em função da tensão ao longo da zona plástica, e o outro das componentes de tensão em função da posição ao longo da zona plástica. Os dados da simulação numérica foram utilizados ponto a ponto nas expressões 6.22 e 6.23 para obter as curvas (gráfico da figura 6.7 (a)) que representam os modelos analíticos deste trabalho e do

modelo CO. O gráfico da figura 6.7 (a) confirma a comparação anterior realizada entre as expressões 6.22 e 6.23.

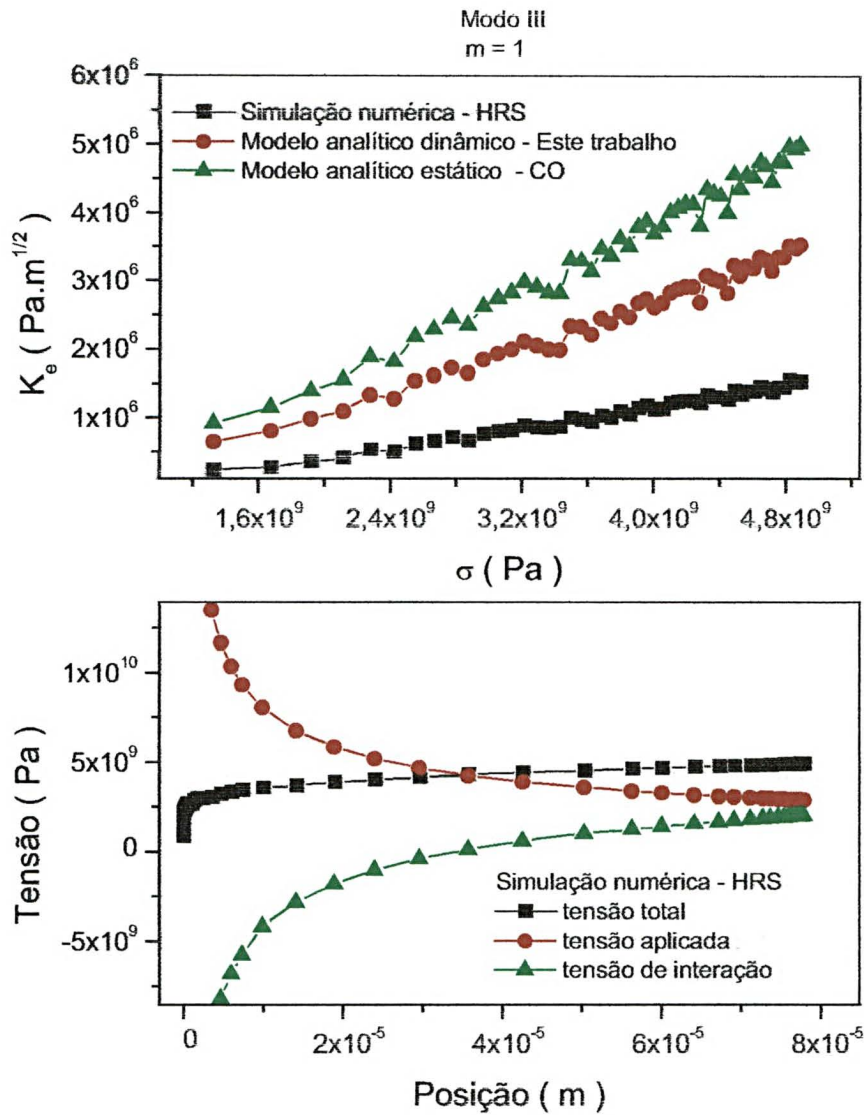


Figura 6.7 – Em (a), comparação entre os modelos de Hirsch et al, este trabalho e Chang & Ohr por meio de gráfico do fator de intensidade de tensão efetivo local em função da tensão ao longo da zona plástica. Em (b), gráfico das contribuições da tensão em função da posição ao longo da zona plástica, para o modelo de Hirsch et al.

A simulação numérica HRS é uma importante ferramenta para analisar os modelos analíticos. O interessante é a diferença entre as curvas simulada e a do modelo

analítico deste trabalho. A princípio, era de se esperar que ambas as curvas ficassem bem próximas, mas isto não ocorre. A explicação para essa discrepância está no fato de que no modelo analítico dinâmico (capítulo 5), foi assumido que a tensão total ao longo da zona plástica é constante. Porém, o gráfico da figura 6.7 (b) mostra que esta tensão total não é uniformemente constante ao longo da zona plástica. Mesmo assim, esta aproximação é aceitável porque σ não varia muito ao longo da zona plástica e, portanto a expressão 6.23 do modelo analítico deste trabalho e a expressão 6.22 do modelo analítico estático de CO podem ser utilizadas.

6.3.COMPARAÇÕES ENTRE AS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS SEGUNDO O MODELO HRS COM O MODELO ANALÍTICO DINÂMICO DESTE TRABALHO PARA OS MODOS II E III

No capítulo 4 foi descrito todo o procedimento para fazer as simulações numéricas HRS, enquanto que no capítulo 5 foi desenvolvido um modelo analítico dinâmico para os modos II e III. Deste modelo analítico serão utilizadas as equações para uma transição frágil-dúctil suave, que foram deduzidas no tópico 5.4. O tamanho da zona plástica (equação 5.72), a tensão ao longo da zona plástica (equação 5.73), o número de discordâncias (equação 5.74) e o fator de intensidade de tensão efetivo local (equação 5.75) são dados, respectivamente, pelas expressões abaixo:

$$a = \left(\frac{C_a \cdot V_0}{K} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \quad (6.24)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \left(\frac{K}{C_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{1}{m+2}}, \quad (6.25)$$

$$n = \frac{2 \cdot \xi}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{C_a \cdot V_0}{K} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+3}{m+2}}, \quad (6.26)$$

$$K_e = \sqrt{e} \cdot \left(\frac{K}{C_a \cdot V_0} \right)^{\frac{1}{m+2}} \cdot \ln \left(4 \cdot \sqrt{\frac{a}{e}} \right) \cdot K^{\frac{1}{m+2}}. \quad (6.27)$$

A simulação numérica torna-se uma ferramenta importante que serve como um padrão de referência para efetuar a comparação com o modelo analítico para os modos II e III (equações 6.24 a 6.27). Essas comparações serão apresentadas nos gráficos das figuras 6.10 a 6.15, onde o modelo analítico dinâmico desenvolvido neste trabalho é representado pela linha preta contínua, enquanto que, as simulações numéricas pelos símbolos coloridos.

As figuras 6.8 e 6.9 apresentam respectivamente a influência da variação da temperatura e da taxa de carregamento, através de gráficos do tamanho da zona plástica, tensão ao longo da zona plástica e o fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada. As figuras 6.10, 6.11 e 6.12 apresentam respectivamente o estudo da variação da temperatura, da taxa de carregamento e do expoente da tensão, através de gráficos do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada. A figura 6.13 apresenta o estudo da variação do expoente da tensão, através de gráficos do tamanho da zona plástica e da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

Os estudos comparativos entre simulação numérica e modelo analítico para os modos II e III, os quais são apresentados nos gráficos das figuras 6.8 a 6.13, demonstram que com o acréscimo da temperatura e do expoente da tensão e o decréscimo da taxa de carregamento, algumas observações podem ser feitas:

- 1) Uma boa concordância entre o modelo analítico dinâmico para os modos II e III e as simulações numéricas do modelo HRS;
- 2) O tamanho da zona plástica e o número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada são aumentados;
- 3) A tensão ao longo da zona plástica e o fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada são diminuídos.

As oscilações que estão presentes nos gráficos das figuras 6.8 (c) e 6.9 (c) são devido ao agrupamento de discordâncias usado no algoritmo do programa, para diminuir o tempo de simulação numérica.

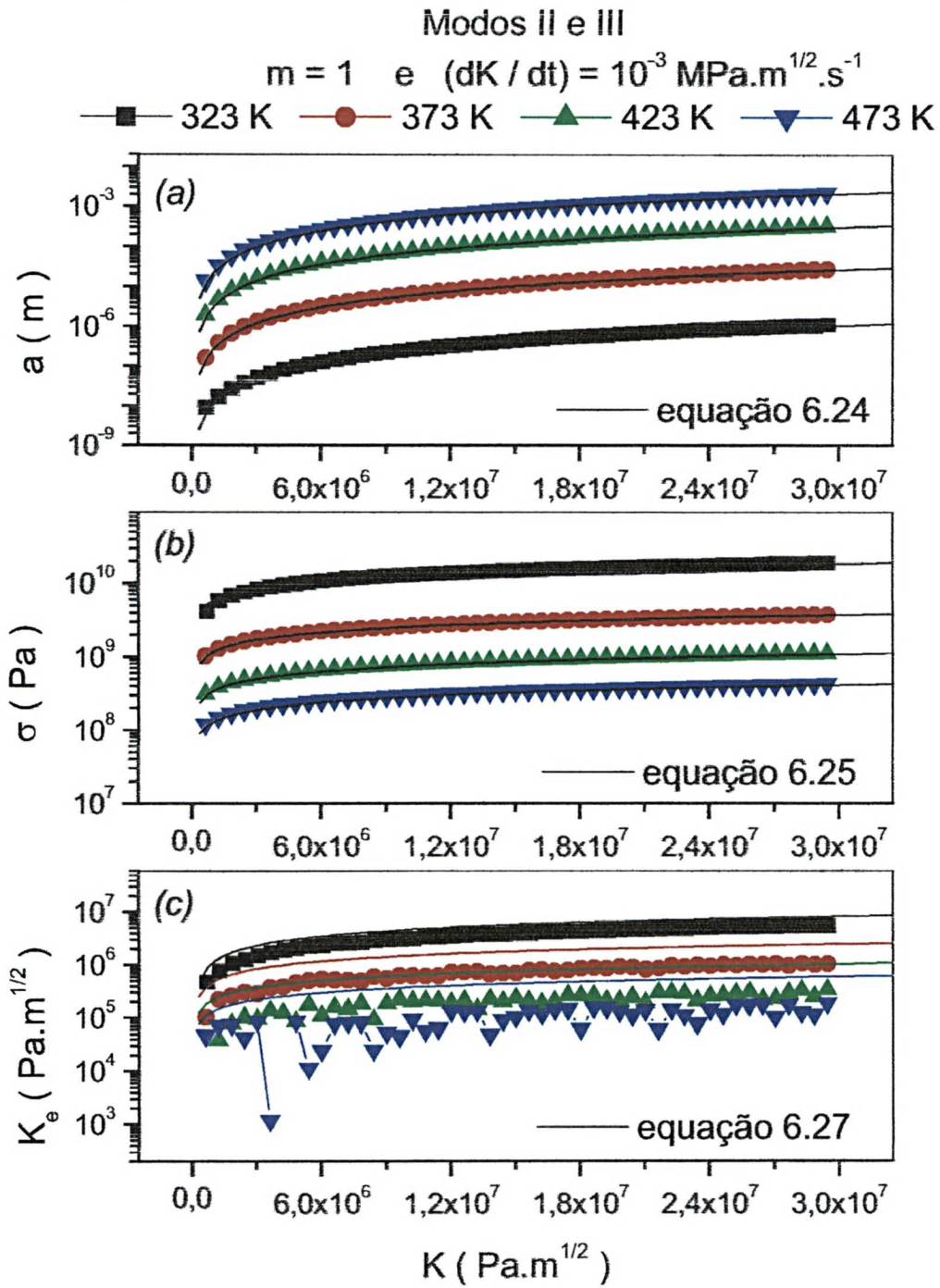


Figura 6.8 – Variação da temperatura para os modos II e III. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

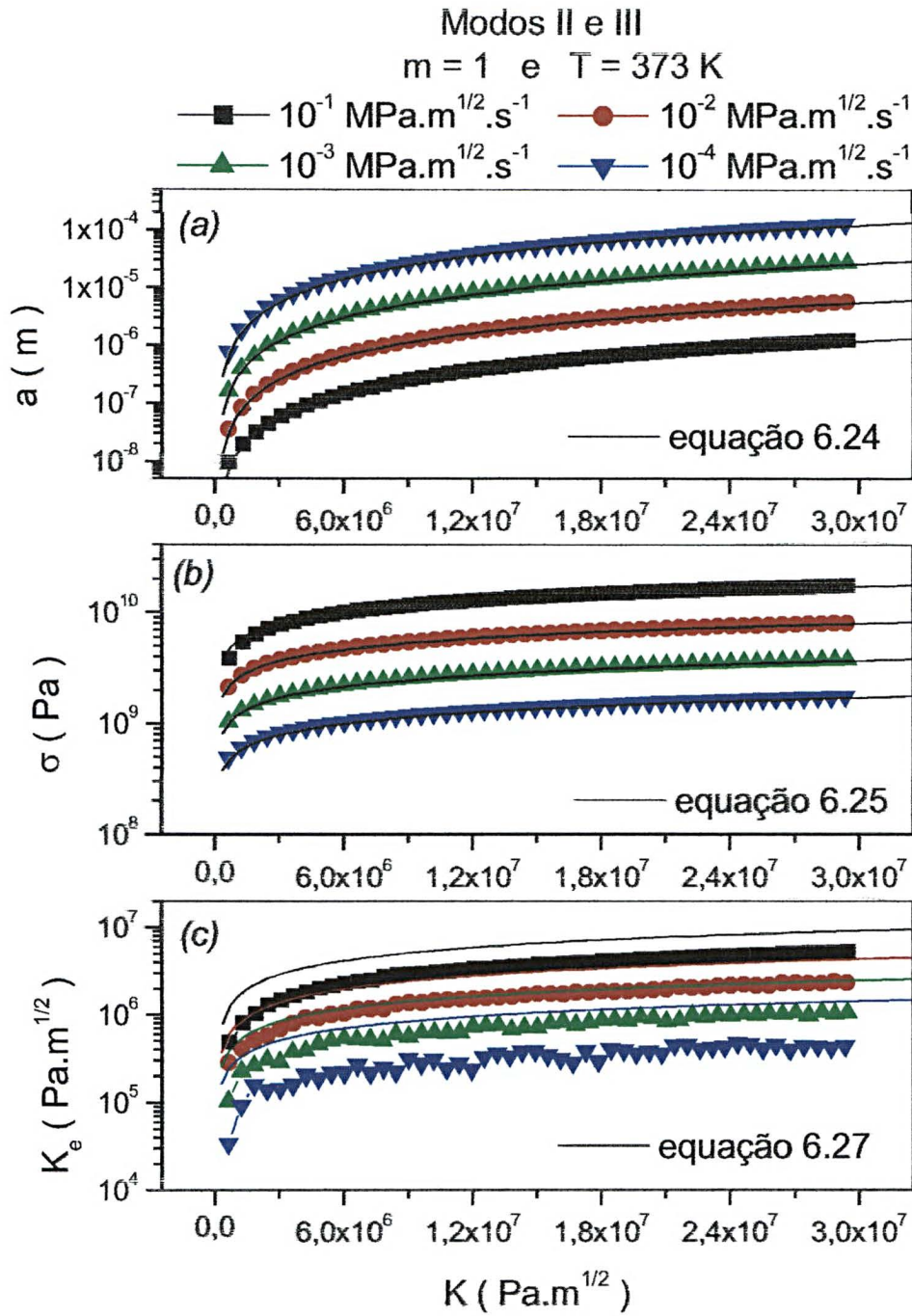


Figura 6.9 – Variação da taxa de carregamento para os modos II e III. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do fator de intensidade de tensão efetivo local em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

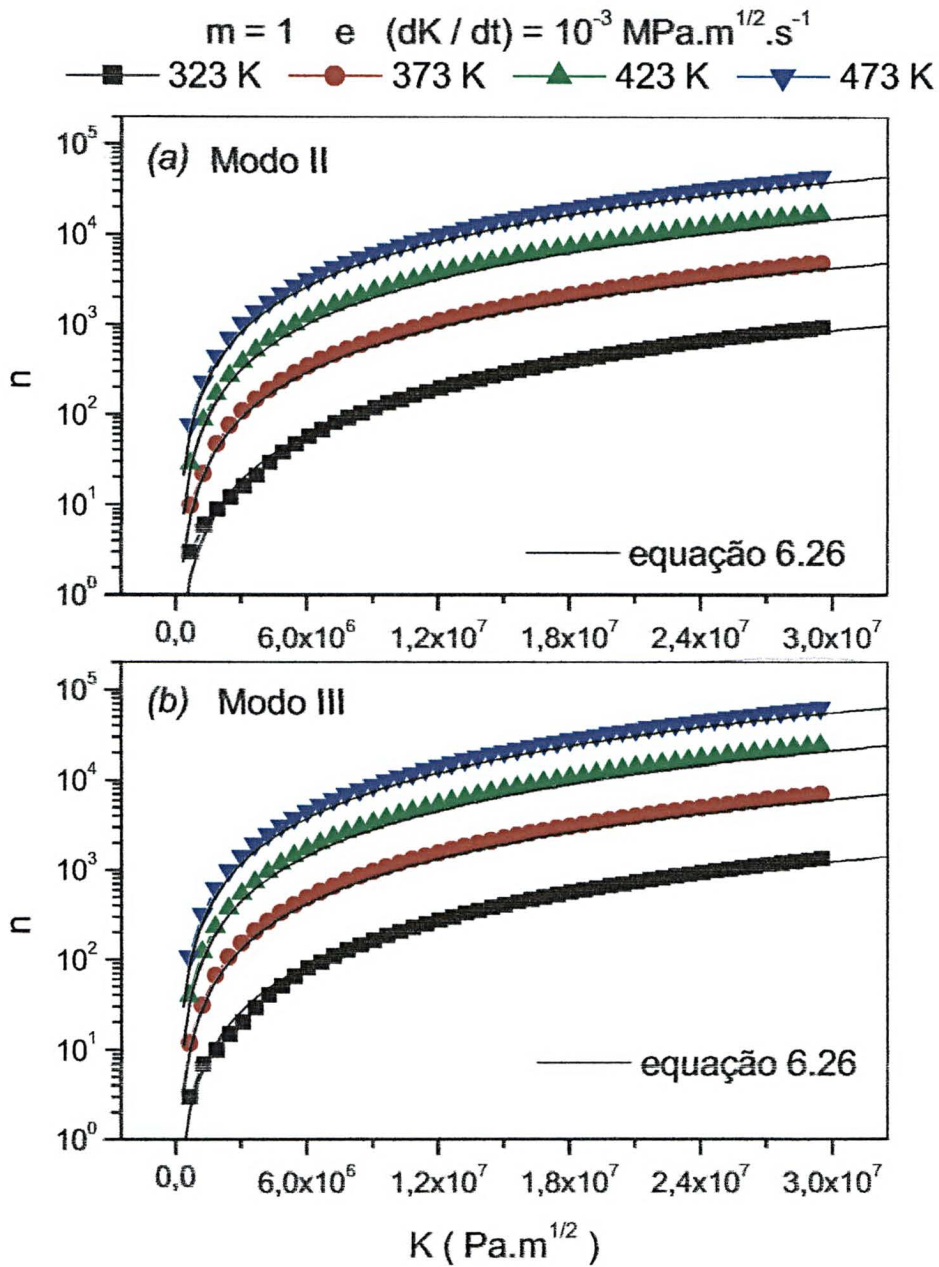


Figura 6.10 – Variação da temperatura. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

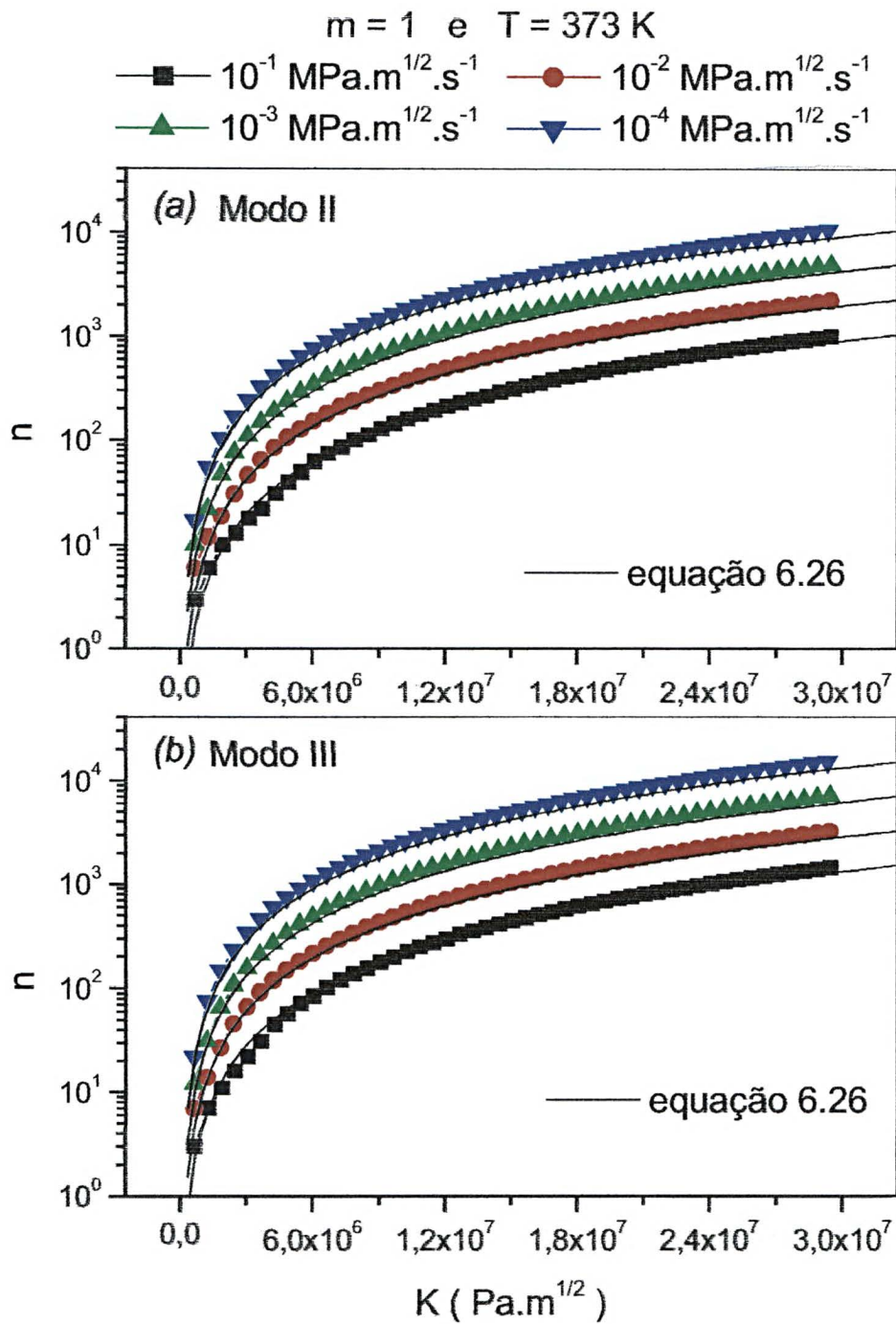


Figura 6.11 – Variação da taxa de carregamento. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

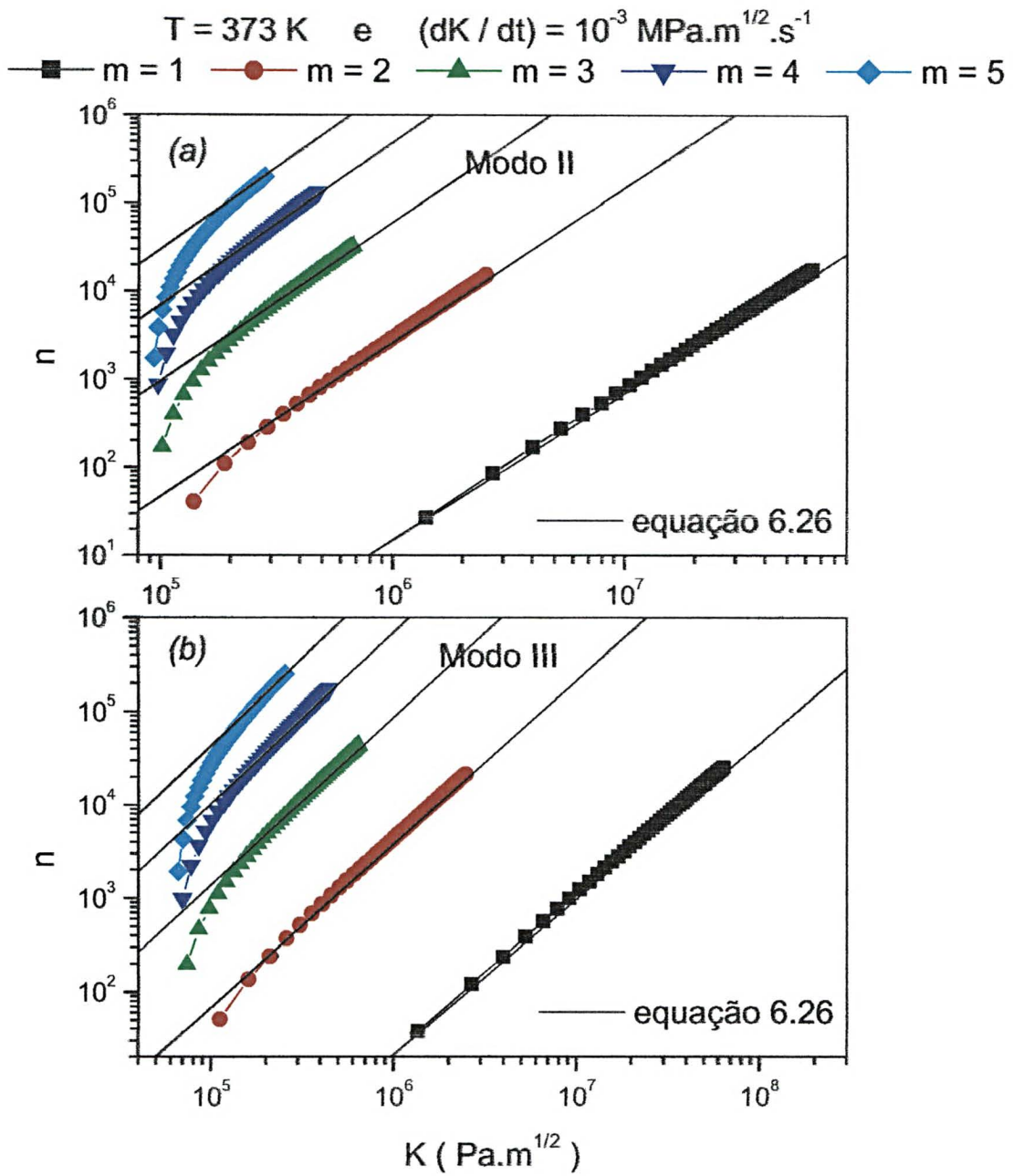


Figura 6.12 – Variação do expoente da tensão. Gráficos do número de discordâncias em (a) para o modo II e em (b) para o modo III em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

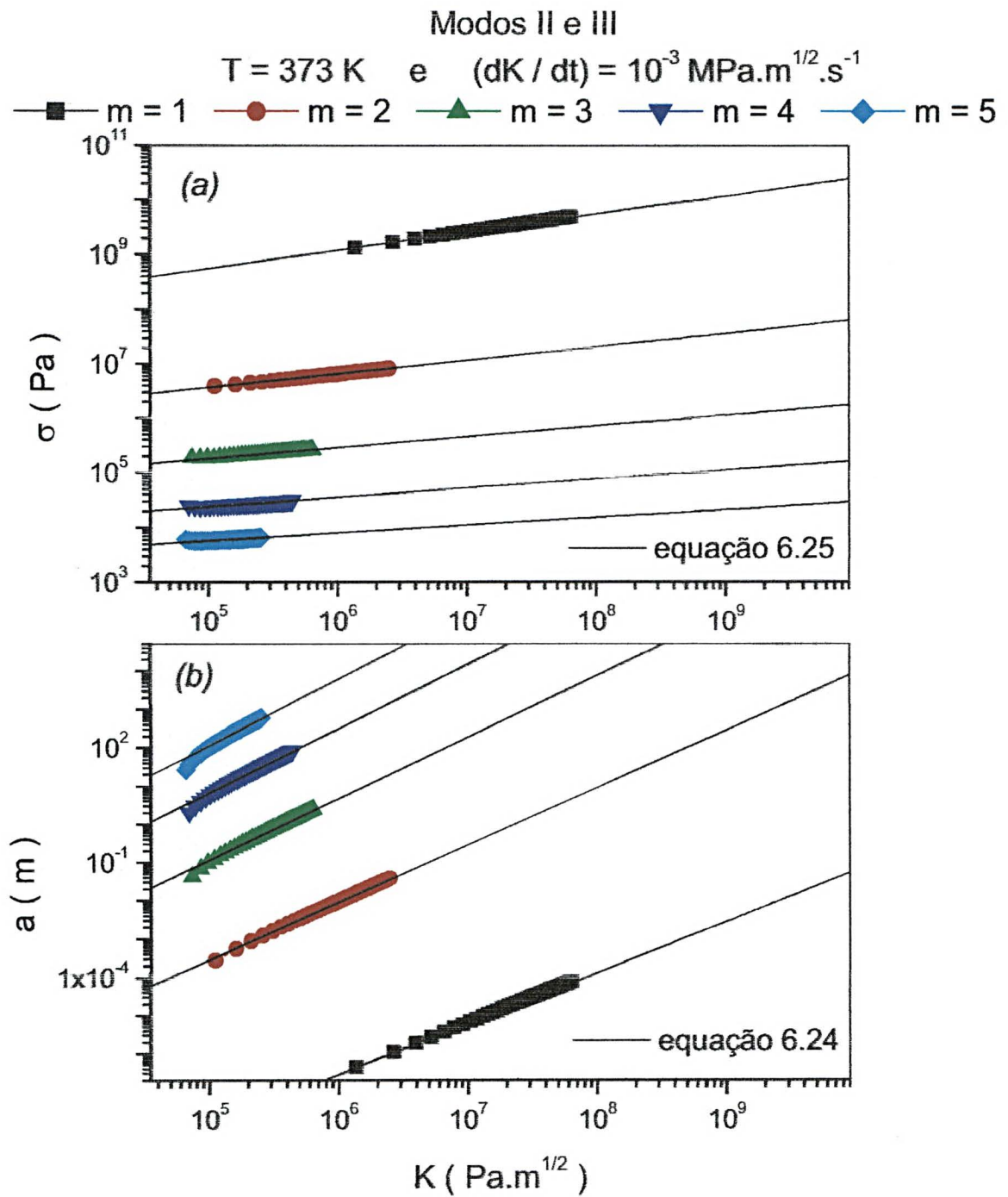


Figura 6.13 – Variação do expoente da tensão para os modos II e III. Gráficos em (a) da tensão ao longo da zona plástica e em (b) do tamanho da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

A tensão ao longo da zona plástica diminui pelo fato do número de discordâncias dentro da zona plástica aumentar consideravelmente, e esta por sua vez também sofre um acréscimo em tamanho. O fator de intensidade de tensão efetivo local, ou seja, a blindagem de discordâncias é influenciada pela densidade de discordâncias perto da ponta da trinca. A tabela 6.2 apresenta uma comparação dos expoentes de K em relação ao tamanho da zona plástica representado pela equação 6.24, com os resultados obtidos por simulação numérica. Esses expoentes foram calculados utilizando o método dos mínimos quadrados, com os dados do gráfico da figura 6.13 (b).

m	$(2m+2)/(m+2)$ <i>Modelo analítico</i>	$(2m+2)/(m+2)$ <i>Simulação Numérica</i>
1	1,33333	1,33566
2	1,50000	1,50279
3	1,60000	1,61115
4	1,66666	1,67841
5	1,71428	1,76464

Tabela 6.2 – Expoente do tamanho da zona plástica (equação 6.24) para os modos II e III.

Observa-se por esta tabela, que existe uma boa concordância entre o modelo analítico e a simulação numérica. A diferença entre os expoentes aumenta com o acréscimo do expoente da tensão, pois é necessário um longo tempo de simulação para que o expoente calculado por simulação numérica se aproxime do previsto pelo modelo analítico. Porém, o objetivo aqui não é ter uma excelente precisão numérica, e sim, uma comparação para mostrar a consistência do modelo desenvolvido.

Simplex expressões matemáticas foram deduzidas e que descrevem a dinâmica da zona plástica em função dos parâmetros da mobilidade de discordâncias. Elas prevêm a evolução do tamanho da zona plástica, tensão ao longo da zona plástica e número de discordâncias quando comparados com simulações numéricas. As influências da temperatura, taxa de deformação aplicada e expoente da tensão também são previstos pelo modelo.

6.4. SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS SEGUNDO O MODELO HRS PARA O MODO I

6.4.1 Estudos das variações da temperatura, taxa de carregamento e expoente da tensão.

Para o modo I segundo o modelo HRS, não foi possível desenvolver expressões matemáticas análogas às equações 6.24 a 6.27 do modelo analítico dinâmico para os modos II e III. A equação 5.29 é uma equação integral singular de difícil resolução, e somente a parte temporal desta equação pôde ser resolvida no capítulo 5, a menos de uma constante D . Assim sendo, simulações numéricas foram realizadas para verificar as evoluções do tamanho da zona plástica, da tensão ao longo da zona plástica, do número de discordâncias, do fator de intensidade de tensão efetivo local e do tamanho da zona livre de discordâncias.

As figuras 6.14 e 6.16 apresentam, respectivamente, o estudo da variação da temperatura e da taxa de carregamento, através de gráficos do tamanho da zona plástica, e da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada. As figuras 6.15 e 6.17 apresentam respectivamente o estudo da variação da temperatura e da taxa de carregamento, através de gráficos do número de discordâncias, do fator de intensidade de tensão efetivo local e do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada. A figura 6.18 apresenta o estudo da variação do expoente da tensão, através de gráficos do tamanho da zona plástica, da tensão ao longo da zona plástica e do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

As simulações numéricas feitas para o modo I, as quais são apresentadas nos gráficos das figuras 6.14 a 6.18, demonstram as mesmas observações feitas nos itens 2 e 3 para os modos II e III discutidas no tópico 6.3 deste capítulo. Com o acréscimo da temperatura e decréscimo na taxa de carregamento, o tamanho da zona livre de discordâncias sofre um aumento considerável.

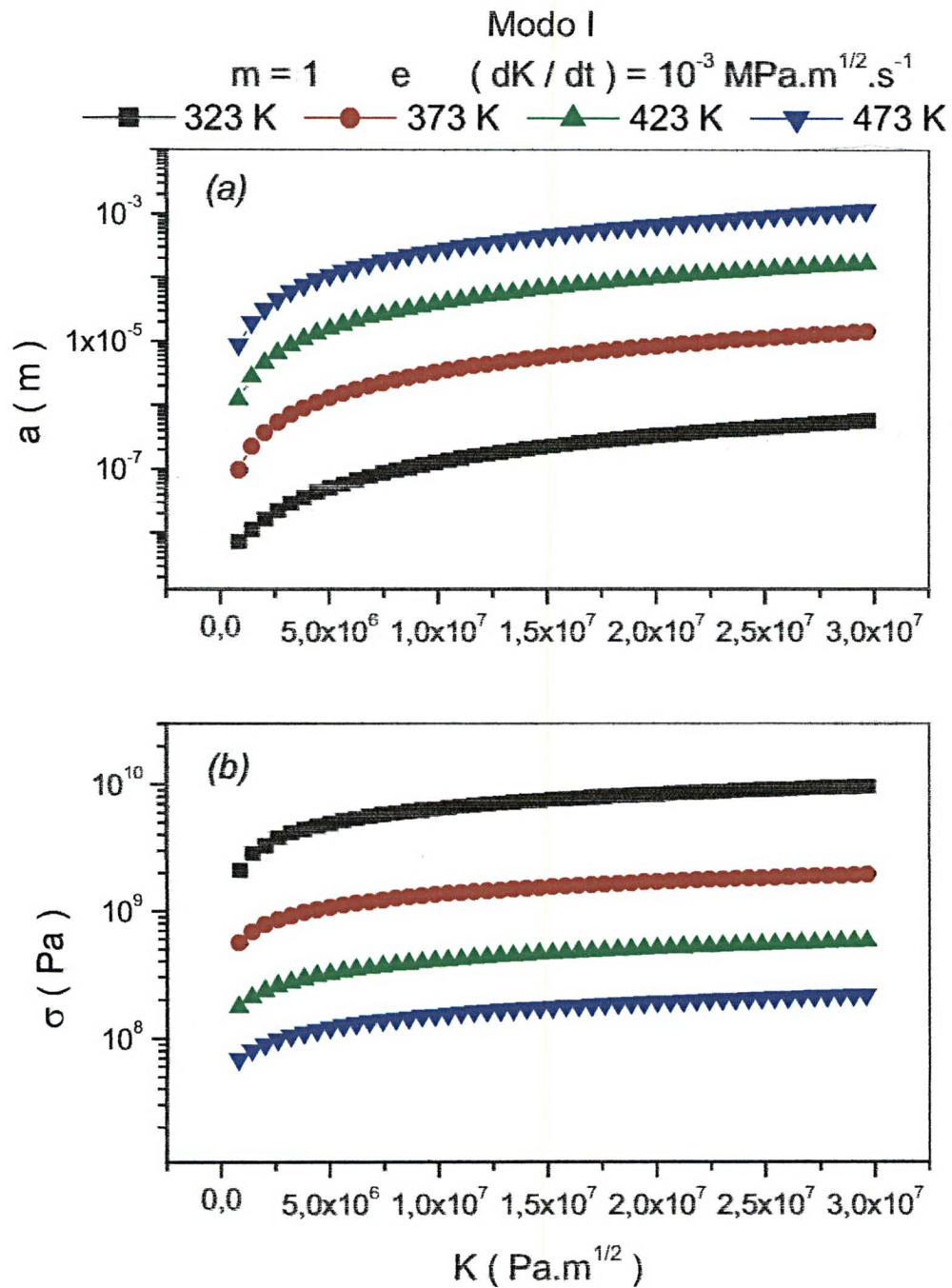


Figura 6.14 – Variação da temperatura para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

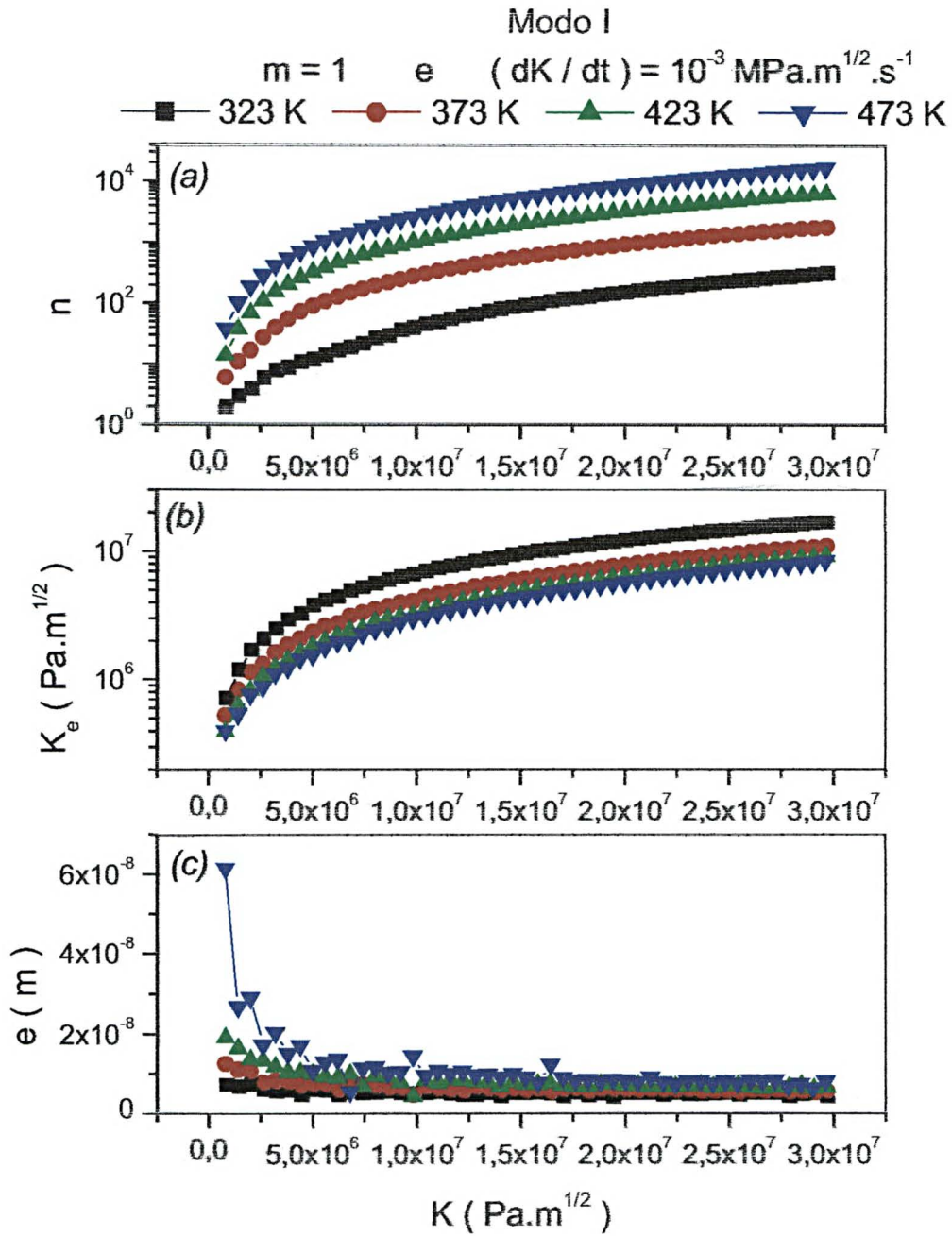


Figura 6.15 – Variação da temperatura para o modo I. Gráficos em (a) do número de discordâncias, em (b) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (c) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

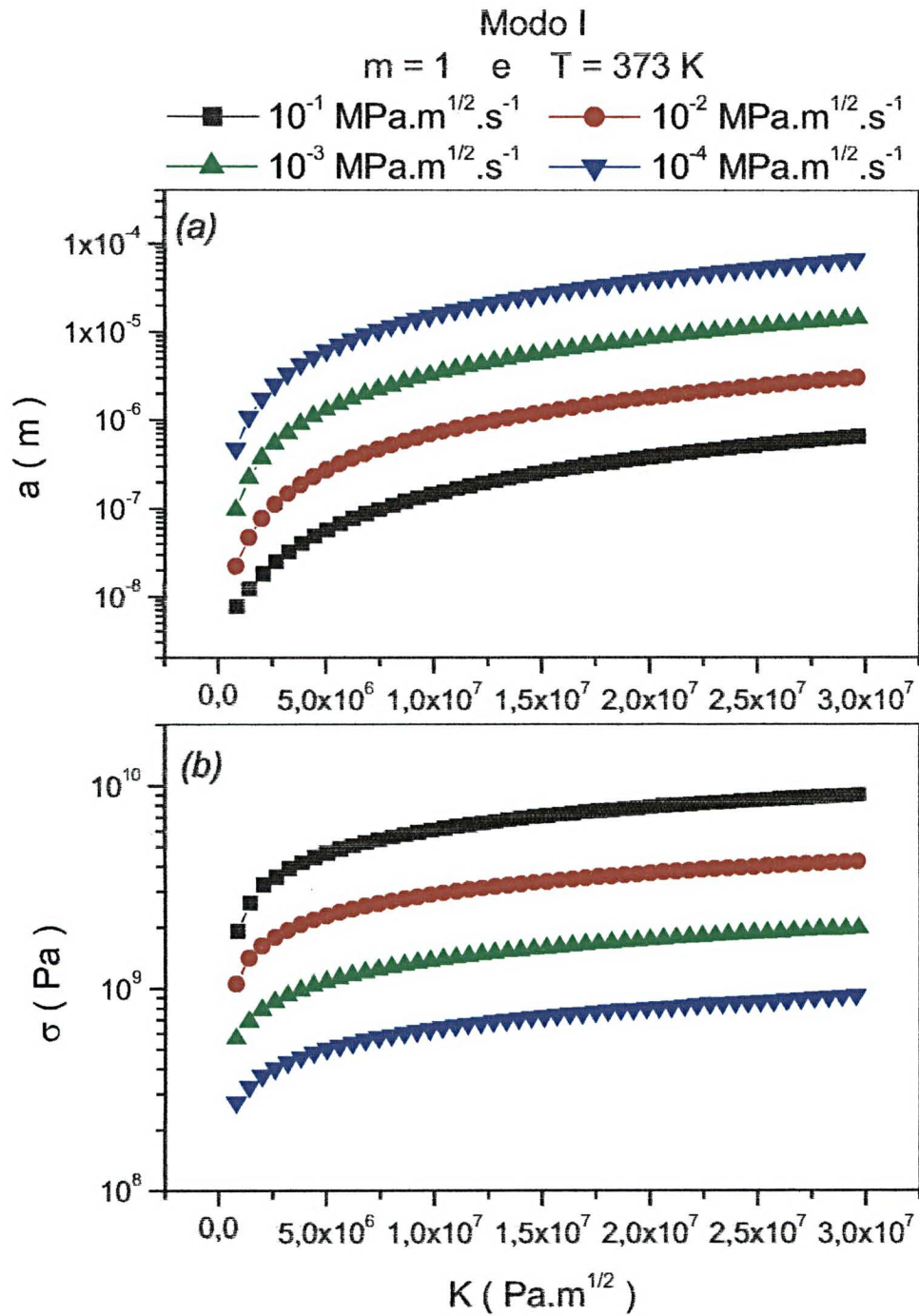


Figura 6.16 – Variação da taxa de carregamento para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) da tensão ao longo da zona plástica em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

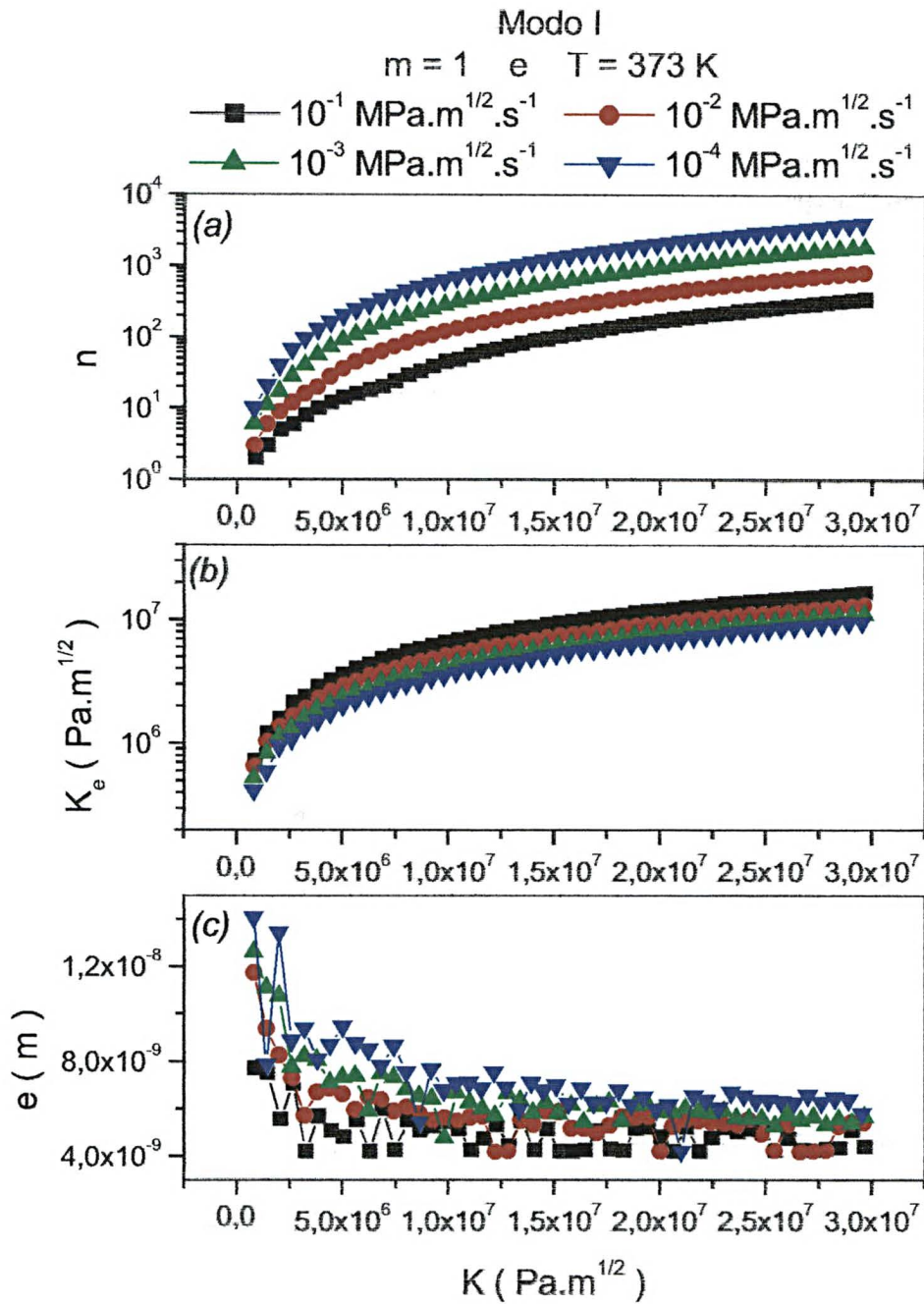


Figura 6.17 – Variação da taxa de carregamento para o modo I. Gráficos em (a) do número de discordâncias, em (b) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (c) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

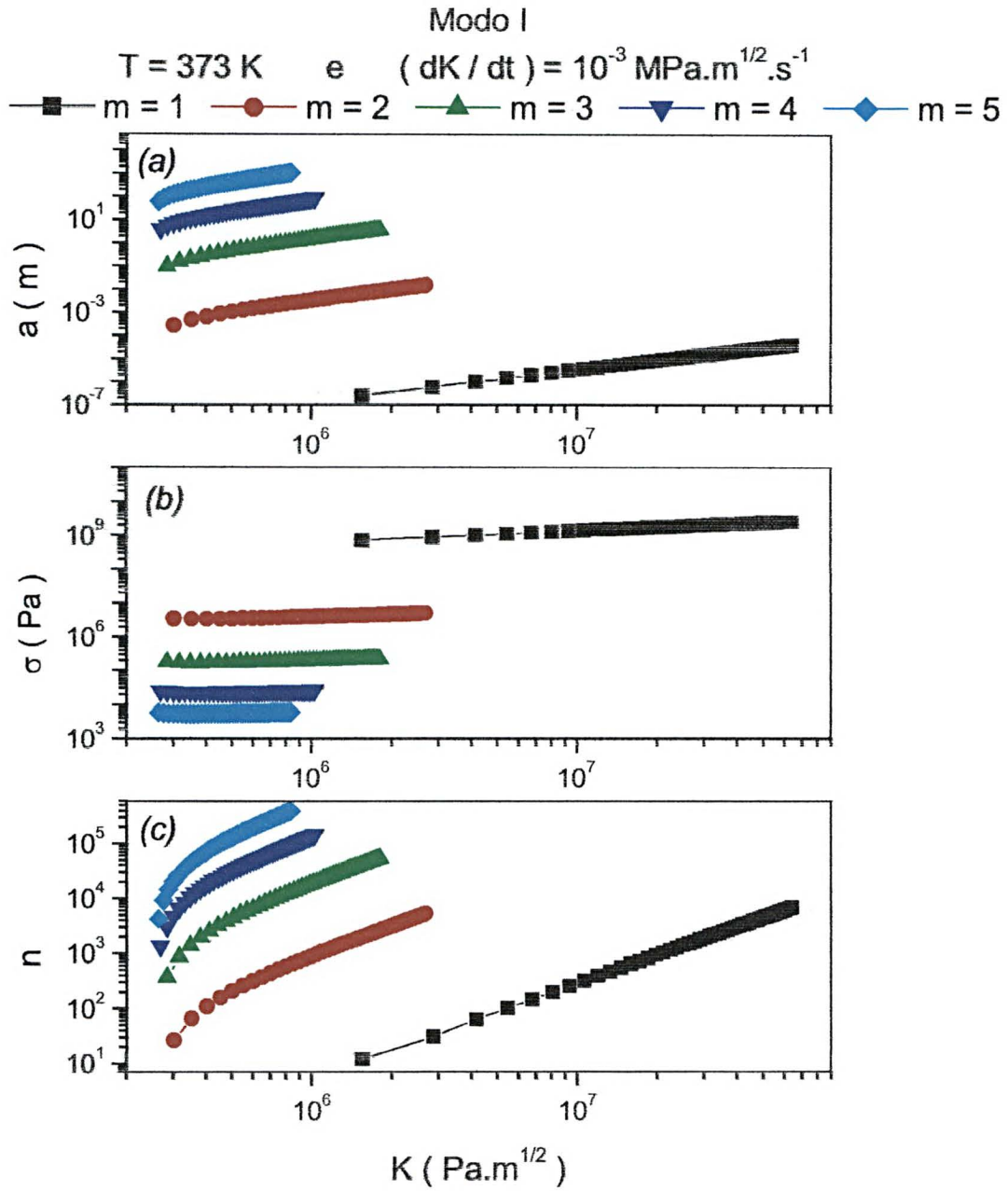


Figura 6.18 – Variação do expoente da tensão para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica, em (b) da tensão ao longo da zona plástica e em (c) do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

6.4.2 Estudo do termo de interação entre discordâncias

Como comentado anteriormente, no capítulo 4 foi descrito e explicado todo o procedimento das simulações numéricas segundo o modelo HRS para o modo I. A tensão de cisalhamento σ_{xy} em qualquer discordância em cunha posicionada a uma distância y_i emitida da ponta da trinca, para o termo total de interação, é dada por [11,45,46]:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \left(\frac{y_j}{y_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(y_i - y_j)} + \frac{8y_i y_j^2}{(y_i + y_j)^3 (y_i - y_j)} \right\}, \quad (6.28)$$

onde as variáveis e as constantes da expressão acima e os parâmetros da simulação foram descritos no capítulo 4. Observe que o termo de interação entre discordâncias da equação 6.28 é composto da soma de dois termos. Então, desta forma foi traçado o objetivo de investigar quais dos dois termos de interação entre discordâncias é predominante na dinâmica das discordâncias em modo I. A tensão de cisalhamento σ_{xy} , para o 1º termo parcial de interação, é dada por:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \left(\frac{y_j}{y_i} \right)^{1/2} \frac{1}{(y_i - y_j)} \right\}, \quad (6.29)$$

e para o 2º termo parcial de interação, a tensão de cisalhamento é dada por:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{4(\pi y_i)^{1/2}} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)y_i} + \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{8y_i y_j^2}{(y_i + y_j)^3 (y_i - y_j)} \right\}. \quad (6.30)$$

As figuras 6.19 (a) e (b) apresentam respectivamente o estudo da variação do termo de interação entre discordância-discordância e discordância imagem na presença da trinca através dos gráficos do tamanho da zona plástica e do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada. As figuras 6.20 (a) e (b) apresentam respectivamente o mesmo estudo, através de gráficos do fator de intensidade de tensão efetivo local e do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

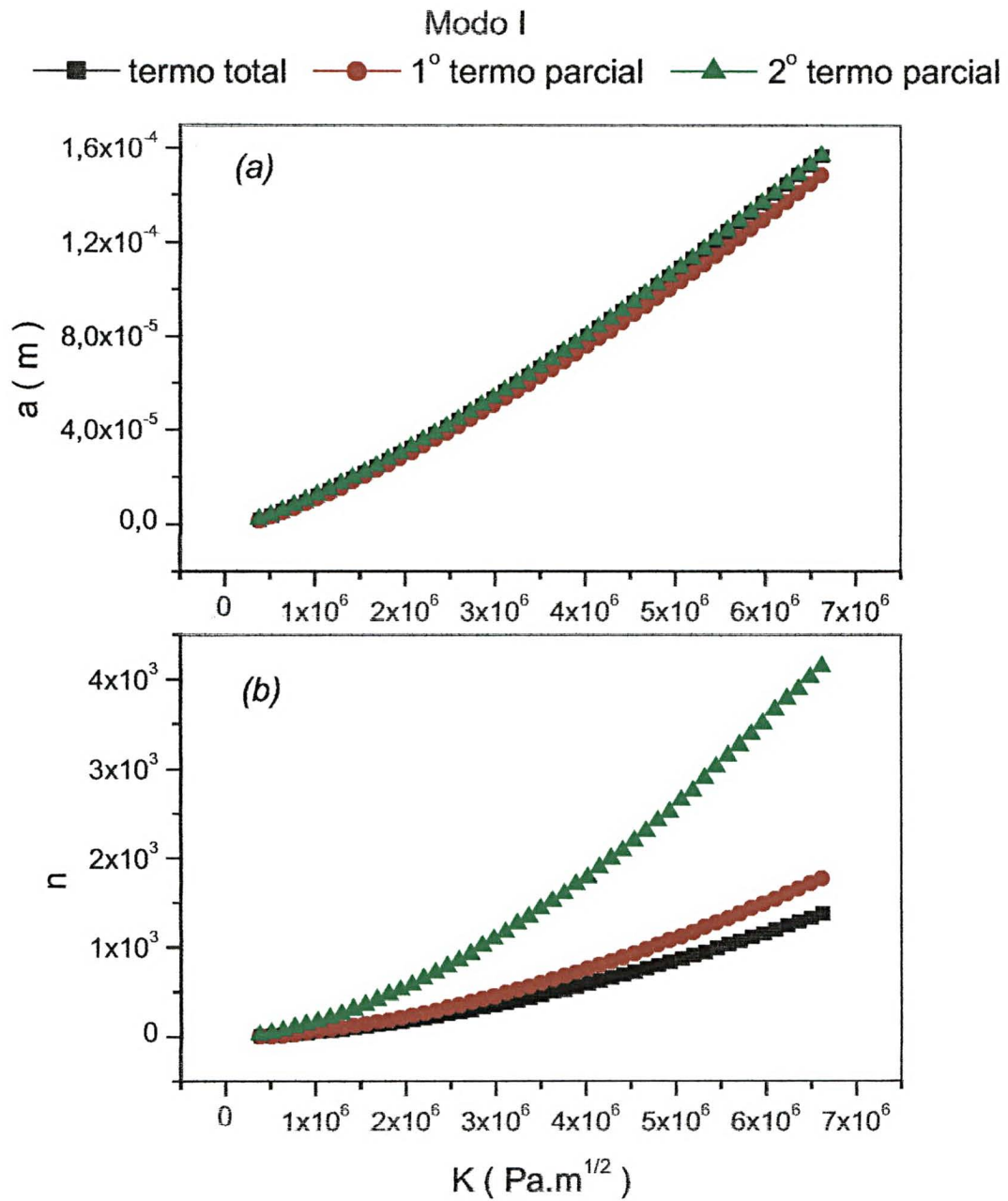


Figura 6.19 – Variação dos termos da tensão de interação para o modo I. Gráficos em (a) do tamanho da zona plástica e em (b) do número de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

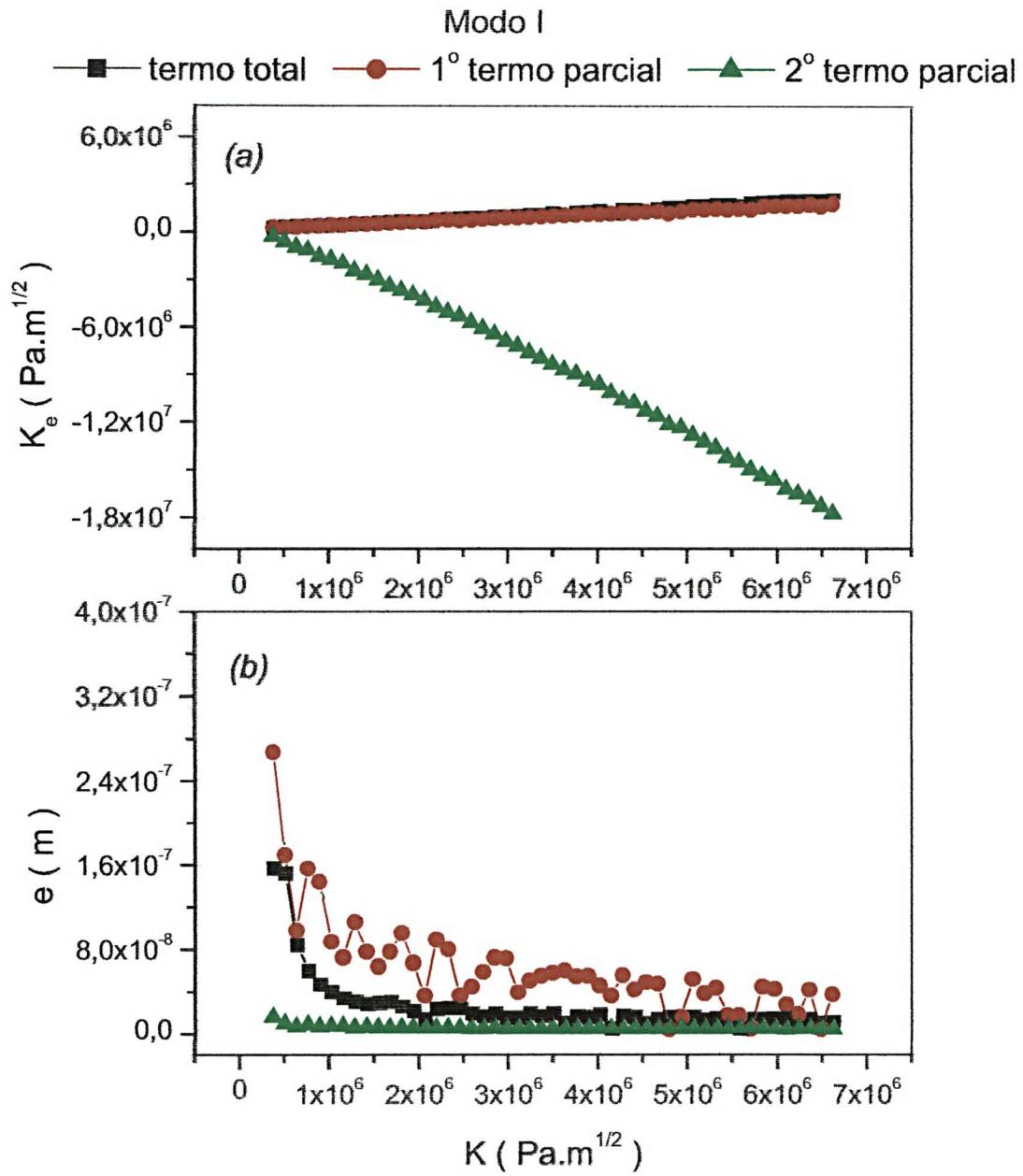


Figura 6.20 – Variação dos termos da tensão de interação para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva e em (b) do tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada.

Os estudos comparativos entre os termos de interação (equações 6.28 a 6.30) para o modo I, os quais são apresentados nos gráficos das figuras 6.19 a 6.20, demonstram que:

- As curvas do tamanho da zona plástica, do número de discordâncias e do fator de intensidade de tensão local efetiva que incluem o 1^o termo parcial de interação, aproximam-se muito da expressão que inclui o termo total de interação;
- As curvas do tamanho da zona plástica e do tamanho da zona livre de discordâncias que incluem o 2^o termo parcial de interação, aproximam-se muito da expressão que inclui o termo total de interação.

Desta análise, é observado que os dois termos de interação (equações 6.29 e 6.30) são importantes dentro da dinâmica das discordâncias. Porém, é verificado que o 1^o termo parcial de interação é o mais apropriado para substituir o termo total de interação, e assim realizar uma aproximação. Deve ser lembrado que para o modo I, a configuração da equação 6.29, não possui modelo analítico dinâmico.

6.4.3 Curvas universais para o modo I

Neste momento já é conhecido que o campo de tensão produzido pelas discordâncias na zona plástica reduz a intensidade de tensão local efetiva K_e na ponta da trinca. No modo III, existem soluções aproximadas para K_e como função da tensão de atrito σ_f , do tamanho da zona plástica a e do tamanho da zona livre de discordâncias e . Tal solução, segundo *Roberts* [22], é dada por:

$$K_e = \frac{3}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \sigma_f \cdot \sqrt{e} \cdot \left(\ln \left(\frac{4 \cdot a}{e} \right) + \frac{4}{3} \right). \quad (6.31)$$

Para o caso da blindagem por discordâncias em cunha em planos de deslizamentos inclinado e ortogonal, não existem soluções analíticas. Será examinada aqui a blindagem de discordâncias para um plano ortogonal. Os dados da simulação

numérica dos gráficos das figuras 6.14 e 6.15, são mostrados no gráfico da figura 6.21,

plotando $\ln\left(\frac{a}{e}\right)$ em função de $\frac{K_e}{\sigma \cdot e^{1/2}}$.

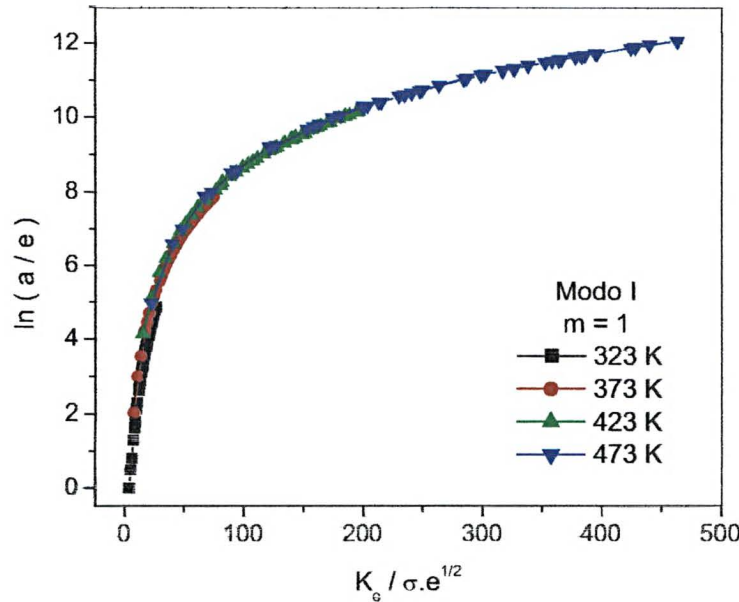


Figura 6.21 – Curva universal para o modo I. Gráfico do logaritmo neperiano de (a/e) em função de $(K_e / \sigma \cdot e^{1/2})$, para diferentes valores de temperatura.

Observe que a curva do gráfico não obedece à linearidade da expressão 6.31. As figuras 6.22 (a) a (c) apresentam respectivamente, para um expoente da tensão igual a 1,

os gráficos de $\frac{K_e}{\sigma \cdot e^{1/2}}$ em função de $\left(\frac{a}{e}\right)$, do número de discordâncias n em função de

$K \cdot a^{1/2}$ e do tamanho da zona plástica a em função do $\left(\frac{K^2}{\sigma^2}\right)$. As figuras 6.23 e 6.24

apresentam os mesmos gráficos das figuras 6.22, para os expoentes da tensão iguais a 2 e 3 respectivamente. Observe que quando os dados da figura 6.21 foram replotados na

figura 6.22 (a), em um gráfico $\ln\left(\frac{K_e}{\sigma \cdot e^{1/2}}\right)$ em função do $\ln\left(\frac{a}{e}\right)$, obtém-se um gráfico

linear indicando uma curva universal e de onde uma lei de potência é obtida.

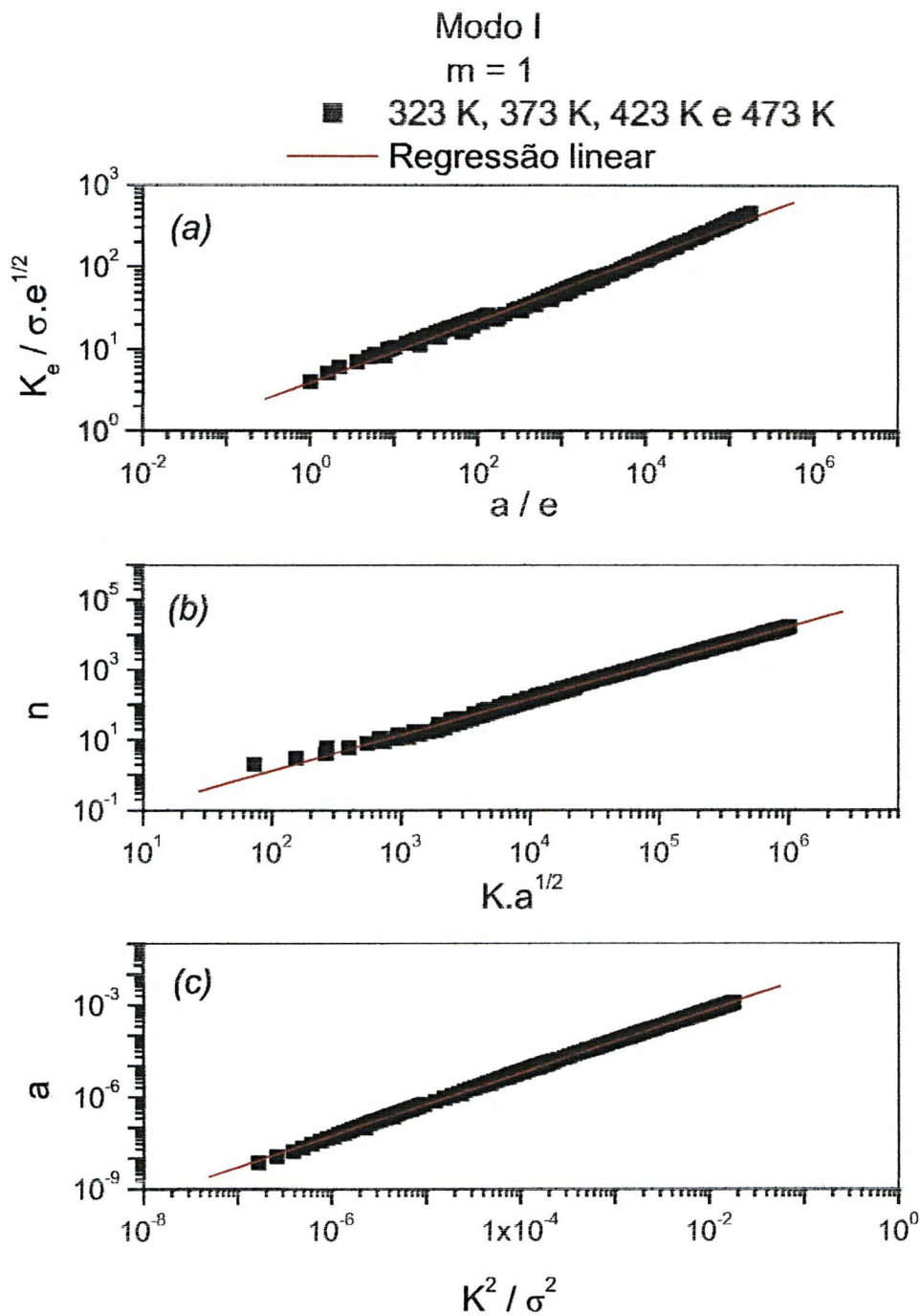


Figura 6.22 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 1.

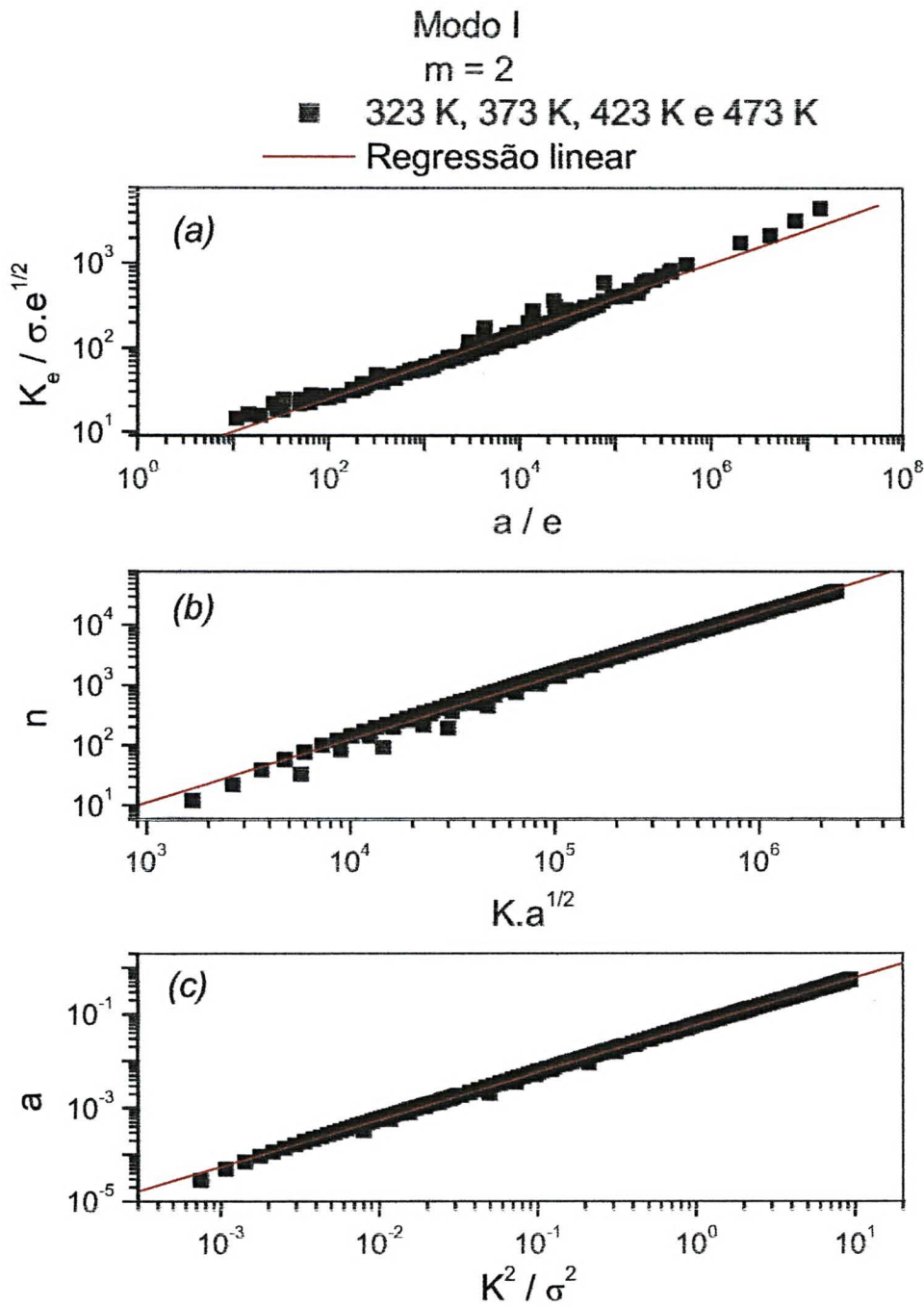


Figura 6.23 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 2.

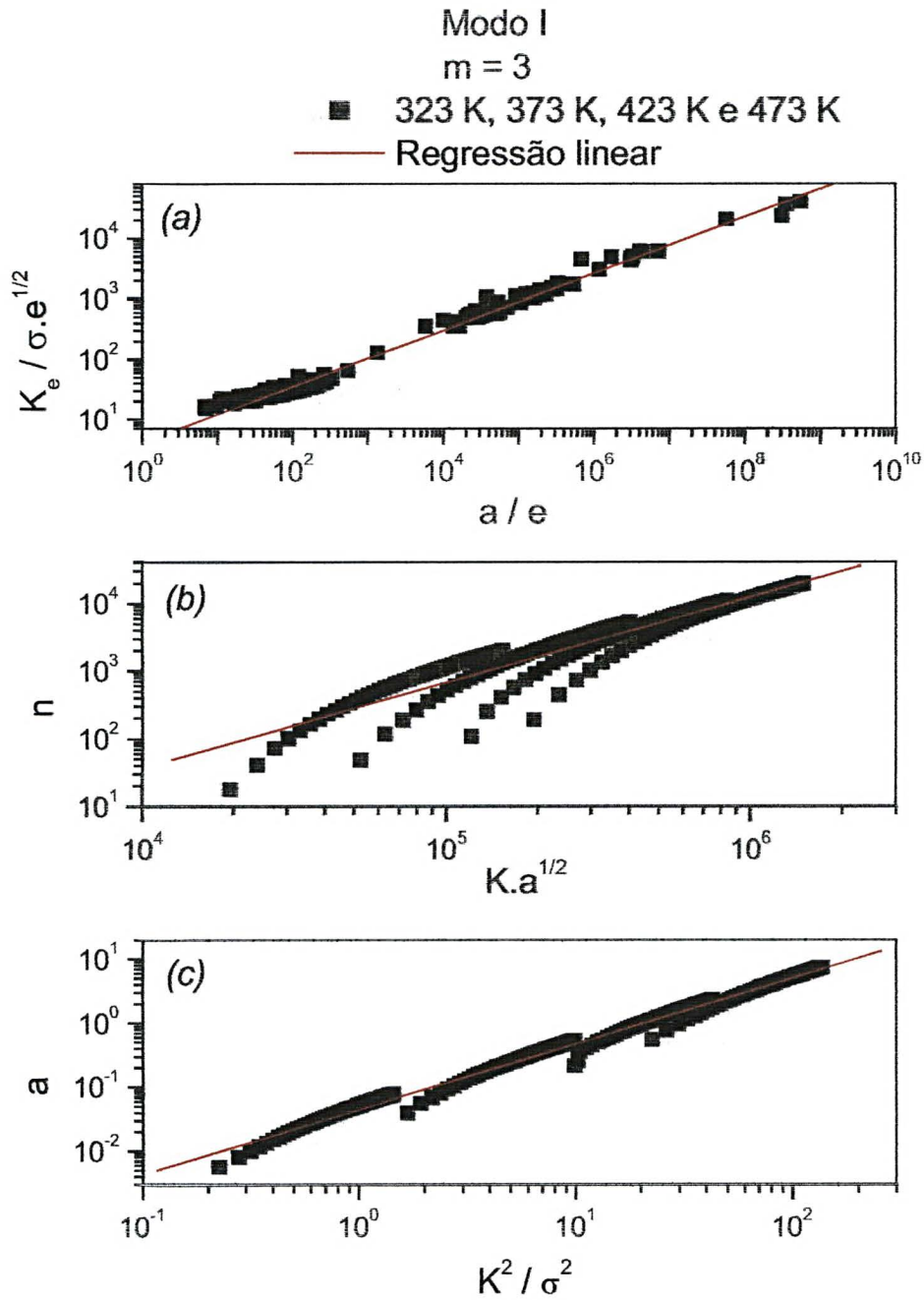


Figura 6.24 – Curvas universais para o modo I. Gráficos em (a) do fator de intensidade de tensão local efetiva, em (b) do número de discordâncias e em (c) do tamanho da zona plástica para o expoente da tensão igual a 3.

Os gráficos das figuras 6.22 a 6.24 foram ajustados pelo método dos mínimos quadrados, e as equações foram obtidas:

$$\frac{K_e}{\sigma_e^{1/2}} = A_I \cdot \left(\frac{a}{e}\right)^{a_I}, \quad (6.32)$$

$$n = B_I \cdot \left(K \cdot a^{1/2}\right)^{b_I}, \quad (6.33)$$

$$a = C_I \cdot \left(\frac{K^2}{\sigma^2}\right)^{c_I} \quad (6.34)$$

e os valores numéricos das constantes das equações acima, para os expoentes da tensão que foram estudados, são apresentados na tabela 6.3.

m	A_I	a_I	B_I	b_I	C_I	c_I
1	1,801	0,382	0,141	1,032	0,325	1,025
2	1,812	0,399	0,118	1,057	0,291	1,011
3	1,844	0,467	0,030	1,264	0,259	1,025

Tabela 6.3 – Valores numéricos das constantes das equações 6.32 a 6.34, obtidas por ajuste dos mínimos quadrados, para o modo I.

Quando o expoente da tensão m é aumentado de 1 para 3, observa-se que um tempo maior de simulação numérica é necessário para o sistema entrar em equilíbrio e por isto os expoentes das equações diferem uns dos outros. No entanto, observa-se uma boa proximidade dos valores. As relações dadas pelas equações 6.32 a 6.34, são leis de potência que conectam o fator de intensidade de tensão efetivo local, a tensão ao longo da zona plástica, o tamanho da zona plástica, o tamanho da zona livre de discordâncias, o número de discordâncias e o fator de intensidade de tensão aplicada.

Como citado anteriormente, somente a parte temporal da equação integral singular para o modo I foi resolvida. A equação do tamanho da zona plástica para uma transição frágil-dúctil suave, que foi deduzida no tópico 5.4, é dada pela expressão a seguir:

$$\alpha = D^{\frac{2m}{m+2}} \left(\frac{D_a \cdot V_0}{\dot{K}} \right)^{\frac{2}{m+2}} \cdot K^{\frac{2m+2}{m+2}}, \tag{6.35}$$

onde $D_a = \frac{(m+2)}{2 \cdot (m+1)}$ e $V_0 = A \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$.

A tabela 6.4 apresenta uma comparação dos expoentes de K do tamanho da zona plástica representado pela equação 6.35 com o calculado por simulação numérica. Esses expoentes foram calculados utilizando o método dos mínimos quadrados, com os dados do gráfico da figura 6.18 (a).

m	$(2m+2) / (m+2)$ <i>Modelo analítico</i>	$(2m+2) / (m+2)$ <i>Simulação Numérica</i>	<i>Constante D</i> <i>Modelo analítico</i>
1	1,33333	1,33762	0,24896
2	1,50000	1,50706	0,21740
3	1,60000	1,60605	0,21409
4	1,66666	1,68989	0,20741
5	1,71428	1,78581	0,20575

Tabela 6.4 – Expoente do tamanho da zona plástica e constante D (equação 6.35) para o modo I.

Observa-se por esta tabela, que existe uma boa concordância entre o modelo analítico e a simulação numérica. A evolução temporal do tamanho da zona plástica para o modo I é semelhante à evolução temporal dos modos II e III. Isto é observado se comparar os expoentes do tamanho da zona plástica das tabelas 6.2 e 6.4, determinados por simulação numérica. A constante arbitrária D das equações 5.29 e 6.35 foi determinada, e é apresentada na tabela 6.4.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Simplex expressões matemáticas foram deduzidas e que descrevem a dinâmica da zona plástica em função dos parâmetros da mobilidade de discordâncias. O modelo analítico dinâmico desenvolvido neste trabalho (segundo o modelo HRS) para os modos II e III mostrou ser consistente quando comparado com as simulações numéricas. Expressões analíticas para o tamanho da zona plástica, a tensão ao longo da zona plástica, o número de discordâncias e o fator de intensidade de tensão efetivo local foram obtidas e demonstraram excelente concordância. As influências da temperatura, taxa de carregamento aplicada e expoente da tensão também são previstos pelo modelo.

O modelo analítico dinâmico para os modos II e III (segundo o modelo HRS) é uma generalização do modelo analítico para o modo III desenvolvido por *Serbena* [11]. Os modelos analíticos dinâmicos para o modo I (segundo os modelos HRS e CK) são resultados novos obtidos por este trabalho.

Para o modo I não foram obtidas todas as expressões analíticas análogas como no modelo analítico dos modos II e III, somente para o tamanho e tensão ao longo da zona plástica, os quais demonstraram boa concordância, quando comparados com as simulações numéricas. Isto ocorreu porque não foi possível resolver a equação integral singular representada na equação 5.29.

Sendo assim, um modelo analítico dinâmico foi desenvolvido neste trabalho (segundo o modelo CK) para o modo I, isto porque o termo de interação entre discordâncias apresentado por *Chen & Kitaoka* é simplificado. Expressões analíticas para o tamanho da zona plástica, a tensão ao longo da zona plástica, o número de

discordâncias e o fator de intensidade de tensão efetivo local foram obtidas. Este modelo desenvolvido neste trabalho demonstrou uma boa concordância quando comparado com as simulações numéricas (segundo o modelo CK) e com o modelo analítico estático CK.

Como sugestões para trabalhos futuros, podemos sugerir:

- 1) Elaborar um critério que explique o comportamento da DFZ para os modos I, II e III (segundo o modelo HRS) por meio de uma simples expressão matemática que relacione o tamanho da zona livre de discordâncias em função do fator de intensidade de tensão aplicada;
- 2) Resolver a equação integral singular para o modo I (segundo o modelo HRS) representada pela equação 5.29, para que expressões análogas às do modelo analítico para os modos II e III possam ser obtidas;
- 3) Aplicar o modelo analítico dinâmico para os modos II e III (segundo o modelo HRS) desenvolvido neste trabalho para o caso da propagação da trinca por fadiga [65,66];
- 4) Comparar o modelo analítico dinâmico para o modo I desenvolvido neste trabalho (segundo o modelo CK) com as simulações numéricas CK para expoentes da tensão mais elevados e em maiores detalhes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] SOUZA, S. A. **Ensaio Mecânicos de Materiais Metálicos**. 5ª ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1982. p. 6–78.
- [2] MICHÉL, M. D. **Efeito da Temperatura em Propriedades Mecânicas de Vidros e Fractografia de Trincas Geradas por Ponta Vickers**. Curitiba, 1998. 108 f. Dissertação (Mestrado), Curso de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Paraná.
- [3] MEYERS, M. A.; CHAWLA, K. K. **Princípios de Metalurgia Mecânica**. 1ª ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1982. p. 127–289.
- [4] <http://www.dcm.puc-rio.br/cursos/cemat/sld157.htm> (consultado em 25/09/2002).
- [5] CALLISTER, W. D. **Materials Science and Engineering: An Introduction**. third edition. New York: John Wiley & Sons, 2000. p. 181–235.
- [6] ANDERSON, T. L. **Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications**. second edition. Texas: CRC Press LLC, 1995. p. 3–116.
- [7] <http://www1.folha.uol.com.br/folha/reuters/ult112u24660.shtml> (consultado em 20/11/2002).
- [8] LOVE, A. E. H. **A Treatise on the Mathematical theory of Elasticity**. fourth edition. New York: Dover Publications, 1944. p. 1–31.
- [9] GRIFFITH, A. A. The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. **Philosophical Transactions A**, v. 221, 1920, pp. 163-198.
- [10] FOERSTER, C. E. **Estudo de Propriedades Mecânicas de Cristais de LiF Submetidos a Implantação Iônica e Radiações (X-Gama)**. Curitiba, 1989. 93 f. Dissertação (Mestrado), Curso de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Paraná.

- [11] SERBENA, F. C. **The Brittle-Ductile Transition of NiAl Single Crystals**. London, 1995. 133 f. Thesis (Doctor of Philosophy), University of Oxford.
- [12] HIRTH, J. P.; LOTHE, J. **Theory of Dislocation**. second edition. New York: Mc Graw-Hill, 1968. p. 3–29.
- [13] WEERTMAN, J.; WEERTMAN, J. R. **Elementary Dislocation Theory**. third edition. New York: Mc Graw-Hill, 1964. p. 1–211.
- [14] HULL, D. **Introduction to Dislocations**. third edition. New York: Pergamon Press, 1965. p. 1–250.
- [15] NABARRO, F. R. N. **Theory of Dislocations**. first edition. New York: Clarendon Press, 1967. p. 1-52.
- [16] KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**. 5^a ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois S. A., 1986. p. 545–567.
- [17] HERTZBERG, R. W. **Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials**. fourth Edition. New York: John & Wiley & Sons, 1996. p. 315–374.
- [18] DIETER, G. E. **Metalurgia Mecânica**. 1^a ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1981. p. 1–250.
- [19] RICE, J. R.; THOMSON, R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. **Philosophical Magazine**, v. 29, 1974, pp. 73-97.
- [20] LIN, I. H.; THOMSON, R. Cleavage, dislocation emission, and shielding for cracks under general loading. **Acta Metallurgica**, v. 34, 1986, pp. 187-206.
- [21] BROEK, D. **Elementary Engineering Fracture Mechanics**. fourth edition. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1986. p. 99–122.
- [22] ROBERTS, S. G. Modelling crack tip plastic zones and brittle-ductile transitions. **Materials Science and Engineering A**, v. 234, 1997, pp. 52-58.
- [23] COTTRELL, A. H. Theory of brittle fracture in steel and similar metals. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, v. 212, 1958, pp. 192-203.

- [24] TATTERSALL, H. G.; CLARKE, F. J. P. Slip distribution and fracture in magnesium oxide. **Philosophical Magazine**, v. 7, 1962, pp. 1977-1994.
- [25] SERBENA, F. C.; ROBERTS, S. G. The brittle-to-ductile transition in germanium. **Acta Metallurgica**, v. 42, 1994, pp. 2505-2510.
- [26] HIRSCH, P. B.; ROBERTS, S. G.; SAMUELS, J. The dynamics of dislocation generation at crack tips and the ductile-brittle transition. **Scripta Metallurgica**, v. 21, 1987, pp. 1523-1528.
- [27] SAMUELS, J.; ROBERTS, S. G. The brittle-ductile transition in silicon. I Experiments. **Proc. Royal Society London A**, v. 421, 1989, pp. 1-23.
- [28] HIRSCH, P. B.; ROBERTS, S. G. Comment on the brittle-to-ductile transition: A cooperative dislocation generation instability; dislocation dynamics and the strain-rate dependence of the transition temperature. **Acta Materialia**, v. 44, 1996, pp. 2361-2371.
- [29] ROBERTS, S. G.; HIRSCH, P. B.; BOOTH, A. S.; ELLIS, M.; SERBENA, F. C. Dislocations, cracks and brittleness in single crystals. **Physica Scripta T**, v. 49, 1993, pp. 420-426.
- [30] BOOTH, A. S.; ROBERTS, S. G. The brittle-ductile transition in γ -TiAl single crystals. **Acta Materialia**, v. 45, 1997, pp. 1045-1053.
- [31] EBRAHIMI, F.; SHRIVASTAVA, S. Brittle-to-ductile transition in NiAl single crystal. **Acta Materialia**, v. 46, 1998, pp. 1493-1502.
- [32] HULL, D.; BEARDMORE, P.; VALINTINE, A. P. Crack propagation in single crystals of tungsten. **Philosophical Magazine**, v. 10, 1965, pp. 1021-1041.
- [33] RIEDLE, J.; GUMBSCH, P.; FISCHMEISTER, H. F. Cleavage anisotropy in tungsten crystals. **Physical Review Letters**, v. 76, 1996, pp. 3594-3597.
- [34] GUMBSCH, P.; RIEDLE, J.; HARTMAIER, A.; FISCHMEISTER, H. F. Controlling factors for the brittle-to-ductile transition in tungsten single crystals. **Science**, v. 282, 1998, pp. 1293-1295.

- [35] BREDE, M.; HAASEN; P. The brittle-to-ductile transition in doped silicon as a model substance. **Acta Metallurgica**, v. 36, 1988, pp. 2003-2018.
- [36] ST JOHN, C. The brittle-to-ductile transition in pre-cleaved silicon single crystals. **Philosophical Magazine**, v. 32, 1975, pp. 1193-1212.
- [37] GEORGE, A.; MICHOT, G. Dislocation loops at cracks tips: nucleation and growth an experimental study in silicon. **Materials Science and Engineering A**, v. 164, 1993, pp. 118-134.
- [38] WARREN, P. D. The brittle-ductile transition in silicon: the influence of pre-existing dislocation arrangements. **Scripta Metallurgica**, v. 23, 1989, pp. 637-642.
- [39] MAJUMDAR, B. S.; BURNS, S. J. A Griffith crack shielded by a dislocation pile-up. **International Journal of Fracture**, v. 21, 1983, pp. 229-240.
- [40] CHANG, S. J.; OHR, S. M. Dislocation-free zone model of fracture. **Journal Applied Physics**, v. 52, 1981, pp. 7174-7181.
- [41] CHANG, S. J.; OHR, S. M. Distribution function of dislocation and condition of finite stress for the dislocation –free zone model of fracture. **International Journal of Fracture**, v. 23, 1983, pp. R3-R6.
- [42] OHR, S. M. An electron microscope study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture. **Materials Science and Engineering**, v. 72, 1985, pp. 1-35.
- [43] CHEN, J.; TAKEZONO, S. The dislocation-free zone at a mode I crack tip. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 50, 1995, pp. 165-173.
- [44] CHEN, J.; KITAOKA, S. Distribution of dislocation at a mode I crack tip and their shielding effect. **International Journal of Fracture**, v. 100, 1999, pp. 307-320.
- [45] HIRSCH, P. B.; ROBERTS, S. G.; SAMUELS, J. The brittle-ductile transition in silicon. II Interpretation. **Proc. Royal Society London A**, v. 421, 1989, pp. 25-53.

- [46] HIRSCH, P. B.; ROBERTS, S. G. The dynamics of edge dislocation generation along a plane orthogonal to a mode I crack. **Scripta Metallurgica**, v. 23, 1989, pp. 925-930.
- [47] ASHBY, M. F.; EMBURY, J. D. The influence of dislocation density on the ductile-brittle transition in bcc metals. **Scripta Metallurgica**, v. 19, 1985, pp. 557-562.
- [48] KELLY, A.; TYSON, W. R.; COTTRELL, A. H. Ductile and brittle crystals. **Philosophical Magazine**, v. 18, 1967, pp. 567-586.
- [49] KHANTHA, M.; POPE, D. P.; VITEK, V. Dislocation screening and brittle-to-ductile transition: A Kosterlitz-Thouless type instability. **Physical Review Letters**, v. 73, 1994, pp. 684-687.
- [50] XU, G.; ARGON, A. S.; ORTIZ, M. Nucleation of dislocations from crack tips under mixed modes of loading: implications for brittle against ductile behaviour of crystals. **Philosophical Magazine A**, v. 72, 1995, pp. 415-451.
- [51] XU, G.; ARGON, A. S.; ORTIZ, M. Critical configurations for dislocation nucleation from crack tips. **Philosophical Magazine A**, v. 75, 1997, pp. 341-367.
- [52] BILBY, B. A.; COTTRELL, A. H.; SWINDEN, K. H. The spread of plastic yield from a notch. **Proc. Royal Society London A**, v. 235, 1963, pp. 304-314.
- [53] DUGDALE, D. S. Yielding of steel sheets containing slits. **Journal Mechanics Physics Solids**, v. 8, 1959, pp. 100-104.
- [54] MUSKHELISHVILI, N. I. **Singular Integral Equations**. first edition. Groningen: P. Noordhoff, 1953. p. 251-253.
- [55] WEERTMAN, J.; LIN, I.-H.; THOMSON, R. Double slip plane crack model. **Acta Metallurgica**, v. 31, 1983, pp. 473-482.
- [56] LAKSHMANAN, V.; LI, J. C. M. Edge dislocations emitted along inclined planes from a mode I crack. **Materials Science and Engineering A**, v. 104, 1988, pp. 95-104.

- [57] NITZSCHE, V. R.; HSIA, K. J. Modelling of dislocation mobility controlled brittle-to-ductile transition. **Materials Science and Engineering A**, v. 176, 1994, pp. 155-164.
- [58] BREDE, M. The brittle-to-ductile transition in silicon. **Acta Metallurgica**, v. 41, 1993, pp. 211-228.
- [59] HARTMAIER, A.; GUMBSCH, P. The brittle-to-ductile transition and dislocation activity at crack tips. **Journal of Computer-Aided Materials Design**, v. 6, 1999, pp. 145-155.
- [60] THOMSON, R. Physics of fracture. **Solid State Physics**, v. 39, 1986, pp. 1-129.
- [61] HEAD, A. K.; LOUAT, N. The distribution of dislocations in linear arrays. **Aust. Journal of Physics**, v. 8, 1955, pp. 1-7.
- [62] BYRD, P. F.; FRIEDMAN, M. D. **Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Physicists**. first edition. Berlin: Springer-Verlag, 1954. p. 1-281.
- [63] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. **Table of Integrals, Series and Products**. New York: Academic Press, 1994. 1 CD-ROM.
- [64] WILLIAM, H. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing**. England: Cambridge University Press, 1997.
- [65] WILKINSON, A. J.; ROBERTS, S. G. A dislocation model for the two critical stress intensities required for threshold fatigue crack propagation. **Scripta Materialia**, v. 35, 1996, pp. 1365-1371.
- [66] WILKINSON, A. J.; ROBERTS, S. G.; HIRSCH, P. B. Modelling the threshold conditions for propagation of stage I fatigue cracks. **Acta Materialia**, v. 46, 1998, pp. 379-390.