

A DINÂMICA DA ZONA PLÁSTICA E A TRANSIÇÃO FRÁGIL-DÚCTIL

Francisco C. Serbena

Laboratório de Ciências dos Materiais, Departamento de Física,
Universidade Estadual de Ponta Grossa/PR
Al. Nabuco de Araújo, s/n, Ponta Grossa, PR
CEP 84031-510
fserbena@uepg.br

***Resumo.** Um modelo analítico para a transição frágil-dúctil foi desenvolvido. A zona plástica ao redor da trinca foi substituída por uma distribuição contínua de discordâncias e expressões analíticas para a dependência temporal do tamanho da zona plástica, do número de discordâncias emitidas e da blindagem da trinca foram obtidas. O modelo é capaz de prever as transições observadas experimentalmente. Os resultados previstos pelo modelo concordam com observações experimentais e simulações computacionais. O modelo revela a importância da mobilidade das discordâncias na determinação da temperatura de transição frágil-dúctil.*

***Palavras-chave:** Transição frágil-dúctil, Zona plástica, Trinca, Discordâncias*

1. INTRODUÇÃO

Os materiais frágeis como cerâmicas e ligas intermetálicas apresentam falta de ductilidade quando submetidos à tensão mecânica. Com o aumento da temperatura, a mobilidade das discordâncias aumenta e eventualmente ocorre deformação plástica. A temperatura na qual ela ocorre é definida como a temperatura de transição frágil-dúctil. Experimentos realizados em amostras pré-trincadas quando submetidos a um aumento constante de carga em diversos materiais (germânio, zircônia, TiAl) (Serbena e Roberts, 1994; Marrow et al., 1994; Booth e Roberts, 1997) revelam que a tenacidade à fratura aumenta gradativamente com a temperatura de teste e a temperatura de transição frágil-dúctil depende da taxa de aplicação de carga. Esta dependência envolve uma energia de ativação igual à energia de ativação térmica para a mobilidade de discordâncias. Tal fato sugere que o mecanismo que controla a transição é a mobilidade das discordâncias dentro da zona plástica que rodeia a trinca e que se move sob a ação do seu campo elástico durante o carregamento. Neste caso, a interação do campo elástico das discordâncias da zona plástica com a trinca resulta na sua blindagem, produzindo uma diminuição da tensão na sua aresta. Modelos computacionais considerando a dinâmica das discordâncias presentes dentro da zona plástica ao redor da trinca durante o carregamento e sua interação com a mesma tem reproduzido com sucesso as observações experimentais (Roberts et al. 1993; Hirsch e Roberts, 1997).

2. O MODELO

O modelo considera uma trinca sobre modo III de carregamento onde a carga aplicada cresce linearmente com o tempo, produzindo uma taxa de aumento do fator de intensidade de tensão \dot{K} constante. Quando o fator de intensidade de tensão aplicado atinge um valor K_o , fontes de discordâncias separadas por uma distância $2d_c$ surgem imediatamente à frente da cabeça da trinca e começam a operar assim que se formam. Os diferentes segmentos das discordâncias emitidas expandem-se sob a ação do campo elástico da trinca. É assumido que um ponto Z é o ponto mais vulnerável na cabeça da trinca e situa-se exatamente a uma distância no meio entre as fontes de discordâncias e a partir deste ponto a trinca se propagará. Deste modo, os segmentos em cunha das discordâncias emitidas se aniquilarão e após uma distância x_c adiante da cabeça da trinca, apenas as componentes em hélice constituirão a zona plástica tal qual é assumido no modelo proposto por (Hirsch et al., 1989). Deste modo, em um determinado tempo t , o aumento do fator de intensidade de tensão fará com que mais discordâncias serão emitidas e se agruparão à zona plástica que se move para dentro do material até a uma distância $a(t)$. Se o número de discordâncias é elevado, estas podem ser substituídas por uma distribuição contínua $\rho(x, t)$.

A tensão total σ que age sobre uma discordância a uma distância x da cabeça da trinca (Majumdar e Burns, 1983; Weertman et al., 1983; Thomson, 1986) é considerada constante no interior da zona plástica e é dada por:

$$\sigma = \frac{\dot{K}(t+t_o)}{\sqrt{2\pi x}} + \frac{\mu b}{2\pi} \int_{x_c}^a \sqrt{\frac{x'}{x}} \cdot \frac{\rho(x', t)}{x-x'} \cdot dx' \quad (1)$$

onde $K_o = \dot{K}t_o$ é fator de intensidade de tensão onde as fontes de discordâncias são formadas. O primeiro termo corresponde à tensão da trinca enquanto o segundo termo é referente às interações discordância-d discordância na presença da trinca e é modificada da forma usual pelo termo $\sqrt{x'/x}$ levando-se em conta as interações entre as discordâncias e suas imagens produzidas pelas superfícies da trinca. A interação da discordância com a sua própria imagem é desprezada, tendo em vista que ela é proporcional a x^{-2} , sendo pequena a grandes distâncias da cabeça da trinca.

É assumido que as discordâncias se movem com uma velocidade v igual a:

$$v = A \cdot \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \sigma^m = v_0 \cdot \sigma^m \quad (2)$$

onde σ é a tensão aplicada, T é a temperatura, U é a energia de ativação térmica para o movimento das discordâncias e A e m são constantes.

Combinando as eqs. (1) e (2) e rearranjando os termos temos:

$$\frac{\sqrt{x}}{v_0^{1/m}} \cdot \left(\frac{da}{dt}\right)^{1/m} = \frac{\dot{K} \cdot (t+t_o)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\mu b}{2\pi} \int_{x_c}^a \frac{\sqrt{u} \cdot \rho(u, t)}{x-u} \cdot du \quad (3)$$

A solução desta equação é:

$$\rho(x, t) = -\frac{\dot{K}(t+t_o)}{\sqrt{a(t)}} \frac{4C}{\mu b \pi} \cdot \alpha_c \cdot \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha(\alpha-\alpha_c)}} \cdot \Pi\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\alpha_c(1-\alpha_c)}{\alpha-\alpha_c}, k\right) \quad (4)$$

$$a = \left(C_a \cdot v_o \cdot \left(\frac{\dot{K}}{E(k)} \right)^m \cdot ((t+t_o)^{m+1} - t_o^{m+1}) + x_c^{(m+2)/2} \right)^{2/(m+2)} \quad (5)$$

onde

$$\alpha = \frac{x}{a(t)}$$

$$C = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \cdot \frac{1}{E(k)}$$

$$k = \sqrt{1-\alpha_c}$$

$$C_a = \left(\frac{m+2}{m+1} \right) \frac{\pi^{m/2}}{2^{3m+2/2}}$$

O número de discordâncias emitidas é

$$n = \int_{x_c}^a \rho(x, t) dx = \frac{2}{\mu b \sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{a} \cdot \alpha_c \cdot \dot{K}(t+t_o) \cdot \frac{K^2(k)}{E(k)} \left(\frac{E^2(k)}{K^2(k)} \cdot \frac{1}{\alpha_c} - 1 \right) \quad (6)$$

A blindagem K_s do fator de intensidade de tensão aplicada K_a é:

$$K_s = \int_{d_c}^a \frac{\mu b}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{\rho(x, t)}{\sqrt{x}} dx = -\dot{K}(t+t_o) \cdot \frac{2\sqrt{\alpha_c}}{\pi} \cdot \left(\left(\frac{\pi}{2} - A_d \right) \frac{K(k)}{E(k)} + \frac{L_k}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 A_d}} - \frac{L_d}{\sqrt{\alpha_c}} \right) \quad (7)$$

onde

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

$$L_k = E(A_d, k) \frac{K(k)}{E(k)} - F(A_d, k)$$

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

$K(k)$, $E(k)$ e $\Pi(\pi/2, \alpha^2, k)$ são equações elípticas completas do primeiro, segundo e terceiro tipo e $F(A, k)$ e $E(A, k)$ são equações elípticas incompletas do primeiro e do segundo tipo.

O fator de intensidade de tensão K_e no ponto Z é:

$$K_e = K_a - K_s$$

e a trinca se propagará quando $K_e = K_{IC}$. Vê-se que nesse caso o fator de intensidade de tensão quando da ruptura $K_a = K_F$ é maior do que o fator crítico de intensidade de tensão por um fator K_s , o que corresponde à blindagem do campo elástico das discordâncias sobre a cabeça da trinca.

3. COMPARAÇÃO COM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS E RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Os resultados preditos pelas eqs.(4), (5), (6) e (7) podem ser comparados com modelos computacionais existentes na literatura (Hirsch et al., 1989). Nestas simulações, as discordâncias são discretas e se movem governadas pela eq. (2). Em um intervalo de tempo Δt , o fator de intensidade de tensão sofre um aumento $\dot{K} \cdot \Delta t$ e as tensões em cada discordância são calculadas. Desta forma, as suas novas posições são atualizadas e o fator de intensidade de tensão no ponto Z é calculado e a fratura ocorrerá quando o fator de intensidade de tensão naquele ponto for igual a K_{IC} .

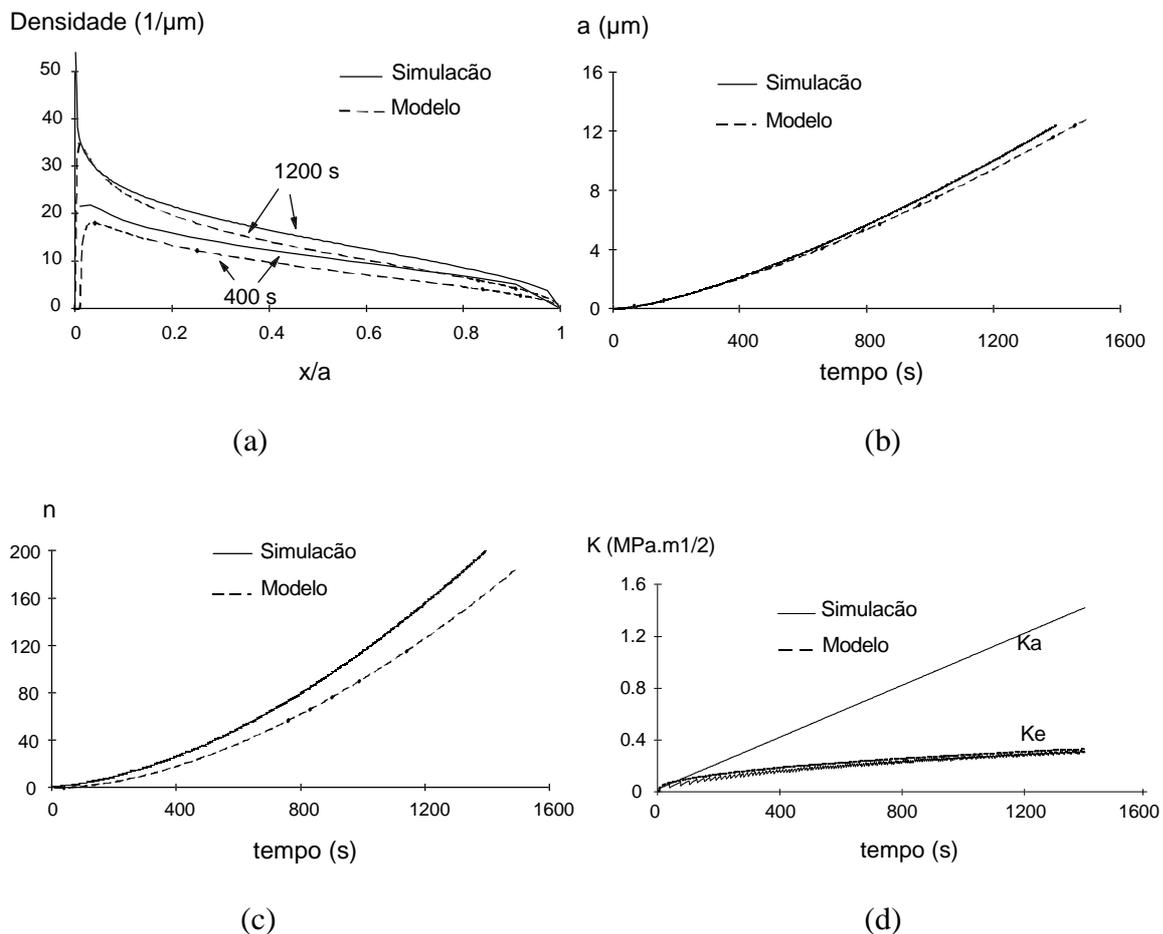


Figura 1. Resultados do modelo analítico quando comparados à simulação computacional: (a) densidade das discordâncias, (b) tamanho da zona plástica, (c) número de discordâncias na zona plástica, (d) fator de intensidade de tensão aplicada e no ponto Z.

$$T=300^{\circ}\text{C}, \dot{K}=1000 \text{ Pa}\cdot\text{m}^{1/2}\cdot\text{s}^{-1}, x_c=2.22\times 10^{-8} \text{ m}$$

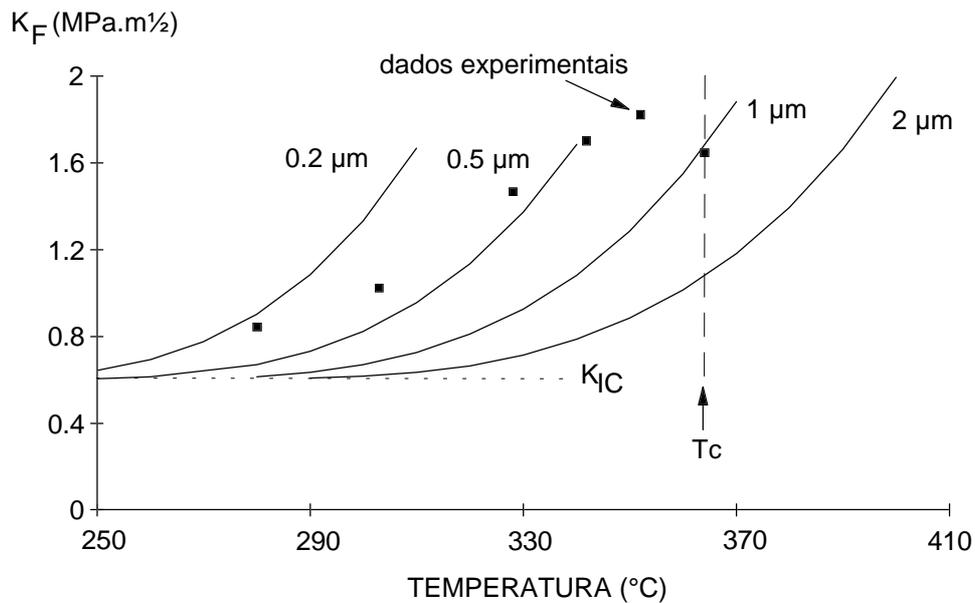


Figura 2. Comparação do modelo com dados experimentais da variação do fator de intensidade de tensão K_F em função da temperatura para o germânio para diferentes valores de x_C . A temperatura da transição frágil-dúctil T_C é indicada. $\dot{K} = 1000 \text{ Pa.m}^{1/2}.\text{s}^{-1}$

Na fig. 1 são representados as predições do modelo analítico e as da simulação computacional para o caso do germânio, onde $m = 1,3$, $U = 1,58 \text{ eV}$ e $A = 1,05 \times 10^{-5} \text{ m.s}^{-1}.\text{Pa}^{-1,3}$ (Patel e Chaudhari, 1966). A fig. 2 mostra os resultados do modelo quando aplicados a dados experimentais da transição frágil-dúctil do germânio (Serbena e Roberts, 1994) assumindo K_{IC} igual a $0,6 \text{ MPa.m}^{1/2}$.

4. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

O modelo analítico desenvolvido neste trabalho é capaz de prever a evolução dos parâmetros da zona plástica tais como o seu tamanho, o número de discordâncias emitidas e distribuição de sua densidade que concordam com aqueles obtidos através de simulação computacional. Além disso, a blindagem calculada pelo modelo do fator de intensidade de tensão no ponto Z devido à presença das discordâncias é muito próxima à aquela calculada pela simulação.

A comparação com os dados experimentais da transição frágil-dúctil do germânio indicam uma zona livre de discordâncias ("dislocation free zone") em torno de $0,5$ a $1 \mu\text{m}$ na frente da cabeça da trinca. Este valor é próximo do valor calculado utilizando simulações computacionais (Serbena, 1995).

O modelo desenvolvido aqui é capaz de prever a temperatura de transição frágil-dúctil para materiais onde a velocidade das discordâncias é conhecida em função da temperatura e tensão aplicada, evidenciando a importância da mobilidade das discordâncias na determinação das principais características da transição frágil-dúctil. Implicações do modelo quanto à generalizações e características gerais do comportamento de materiais frágeis e semi-frágeis serão discutidos em outro artigo (Serbena, 1999).

Agradecimentos

Este trabalho foi desenvolvido como parte da tese de doutorado de F.C. Serbena no Departamento de Materiais da Universidade de Oxford, UK. O autor agradece o apoio

financeiro da CAPES, da Universidade Estadual de Ponta Grossa e inúmeras e frutíferas discussões com Prof. Sir P.B. Hirsch, Drs. S.G. Roberts, A. Jacques, B. DeVincre, T.J. Marrow, A.S. Booth, M. Ellis e ao todo grupo "SGR".

5. REFERÊNCIAS

- Booth, A.S. e Roberts, S.G., 1997, The brittle-ductile transition in gamma-TiAl single crystals, *Acta Mater*, vol. 45, pp. 1017-1023
- Hirsch, P.B., Roberts, S.G. e Samuels, J., The brittle-ductile transition in silicon. II. Interpretation, *Proc. R. Soc. Lond.*, vol. A421, pp. 25-53
- Hirsch, P.B. e Roberts, S.G., 1997, Modelling crack tip plastic zones and the brittle-ductile transition, *Phil. Trans. Roy. Soc.*, vol. 355, pp. 1991-2001
- Majumdar, B.S. e Burns, S.J., 1983, *Int. Journ. of Fracture*, vol. 21, pp. 229
- Marrow, T.J., Roberts, S.G. e Pearce-Higgins, A.K., 1994, The brittle-ductile transition in cubic stabilised zirconia, *J. Euro. Ceram. Soc.*, vol. 14, pp. 447-453
- Patel, J.R e Chaudhari, A.R., 1966, *Phys. Ver.*, vol.143, pp. 601
- Roberts, S.G., Hirsch, P.B., Booth, A.S., Ellis, M. e Serbena, F.C., 1993, Dislocations, cracks and brittleness in single crystals, *Physica Scripta*, vol. T49, pp. 420-426
- Serbena, F.C. e Roberts, S.G., 1994, The brittle-ductile transition in germanium, *Acta Metall. Mater.*, vol. 42, pp. 2505-2510
- Serbena, F.C., 1995, The brittle-ductile transition of NiAl single crystals, Ph.D. thesis, University of Oxford, Oxford, UK
- Serbena, F.C., 1999, artigo a ser submetido a *Acta materialia*
- Thomson, R., 1986, *Solid State Physics*, vol. 39, pp. 1
- Weertman, J., Lin, I-H. e Li, J.C.M., 1983, *Acta metall.*, vol. 31, pp. 473

THE DYNAMICS OF THE PLASTIC ZONE AND THE BRITTLE-DUCTILE TRANSITION

Francisco C. Serbena

Laboratório de Ciências dos Materiais, Departamento de Física,
Universidade Estadual de Ponta Grossa/PR
Al. Nabuco de Araújo, s/n, Ponta Grossa, PR
CEP 84031-510
fserbena@uepg.br

Abstract. *An analytical model for the brittle-ductile transition is developed. The plastic zone around the crack is considered as a continuous distribution of dislocations and analytical expressions for the time dependence of the plastic zone size, number of dislocations emitted and the crack tip shielding are presented. The results predicted by the model agrees with the main features of the experimental observations and computer simulations. The model highlights the importance of dislocation mobility in controlling the brittle-ductile transition.*

Palavras-chave: *Brittle-ductile transition, Plastic zone, Crack, Dislocations*