



SIMULATION OF CRACK TIP STRESS FIELDS IN ELASTIC-PLASTIC FCC SINGLE CRYSTALS

Guilherme Fiorin Fornel

Eduardo Bittencourt

guilherme.fornel@ufrgs.br

eduardo.bittencourt@ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Departamento de Engenharia Civil

Av. Osvaldo Aranha, 99, 90035-190, Porto Alegre, RS, Brazil

Rafael Luis Moresco

rafael_moresco01@yahoo.com.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Abstract. *In this work, stress fields at the crack tip in FCC (face-centered cubic) metals considering the elastic-plastic behavior of the crystalline microstructure are obtained numerically and compared with the analytical solutions proposed by Rice (1987) and Drugan (2001). It is assumed that the crack tip is inserted into a grain (single crystal), disregarding the effect of adjacent grains. It is considered a two-dimensional geometry, with the single crystal oriented at plane $(1\bar{1}0)$ and blocked strains in the $[1\bar{1}0]$ direction, characterizing plane-strain. Such conditions allow treating the problem considering only three active crystalline systems. The analysis covers small strains, rate-independent and perfectly-plastic behavior. The finite element method is used for discretization of the problem.*

Keywords: *Crystal plasticity, Fracture, Finite element*

1 INTRODUÇÃO

É de conhecimento geral que o comportamento à fratura de metais é fortemente afetado pela evolução dos fenômenos físicos que ocorrem na ponta das trincas, a uma escala onde o comportamento do material é fortemente dirigido pelo comportamento da micro e nanoestruturas. Entre os fenômenos importantes estão a **deformação plástica a nível da estrutura cristalina** e a separação do material na escala atômica. Os efeitos nas menores escalas porém são responsáveis pelo que se manifesta na escala macroscópica através da propagação de efeitos entre as diferentes escalas do material. Assim, os eventos de fratura não pode ser completamente compreendidos senão através de uma abordagem multiescala.

Este trabalho visa obter numericamente os campos de tensões na ponta de trincas considerando a anisotropia devido à escala cristalina dos metais através de um modelo em plasticidade monocristalina em mecânica do contínuo e compará-los com resultados analíticos da literatura. A compreensão de modelos deste tipo são de importância na análise numérica das condições de estabilidade e propagação de trincas em metais.

1.1 Rede cristalina cúbica de face centrada

Neste estudo considera-se o comportamento de sólidos metálicos que cristalizam em uma estrutura cúbica de face centrada (CFC). Exemplo de metais que cristalizam neste tipo de rede são alumínio, cobre, ouro prata e níquel. Neste tipo de estrutura há um átomo em cada vértice da célula cúbica e um átomo na posição intermediária de cada face da célula, como apresentado na Fig. 1.

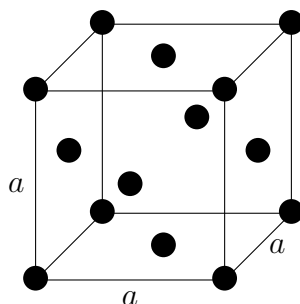


Figura 1: Estrutura cristalina *Cúbica de Face Centrada* (CFC) de aresta a .

Sabe-se que devido a simetria esta estrutura possui 12 sistemas de deslizamento cristalinos independentes (de um total de 24), formados pela combinação da família de planos $\{111\}$ (4 planos independentes) com a família de direções $\langle 111 \rangle$ (3 direções independentes).

2 PLASTICIDADE CRISTALINA EM MEIOS CONTÍNUOS

A teoria de plasticidade cristalina macroscópica tratada aqui considera dependência de propriedades microestruturais de monocristais metálicos. Os campos de tensões e deformações são considerados localmente dependentes. As relações constitutivas são consideradas independentes da taxa de carregamento. A deformação plástica é tratada como proveniente do deslizamento de porções do cristal em relação a planos cristalográficos bem definidos.

2.1 Cinemática da deformação em monocristais

O comportamento mecânico macroscópico de materiais é classicamente descrito através da mecânica dos meios contínuos. A relação entre duas configurações materiais de um corpo é descrita por relações de transformações vetoriais como função da posição das partículas materiais. Um vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração de referência Ω é relacionado com o vetor infinitesimal $d\mathbf{x}$ na configuração atual Ω' através da transformação

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X} \quad (1)$$

onde $\mathbf{F}$ é o gradiente de deformação. De forma semelhante, a anisotropia macroscópica característica da deformação de monocristais metálicos pode ser tratada através da mecânica do contínuo através de uma abordagem multiescala, que considera aspectos microscópicos do material. Considerando que a deformação plástica em monocristais é relacionada aos movimentos de discordâncias em seu interior (Hirth & Lothe, 1982), Asaro & Rice (1977) propuseram a decomposição da deformação na rede cristalina em uma parcela plástica devido ao movimento de discordâncias e uma parcela elástica devido à distorções na estrutura do cristal (Fig. 2). Assim, o gradiente de deformações é decomposto segundo a relação $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p$; $\mathbf{F}^e$ é a parcela elástica e $\mathbf{F}^p$ é a parcela plástica do gradiente.

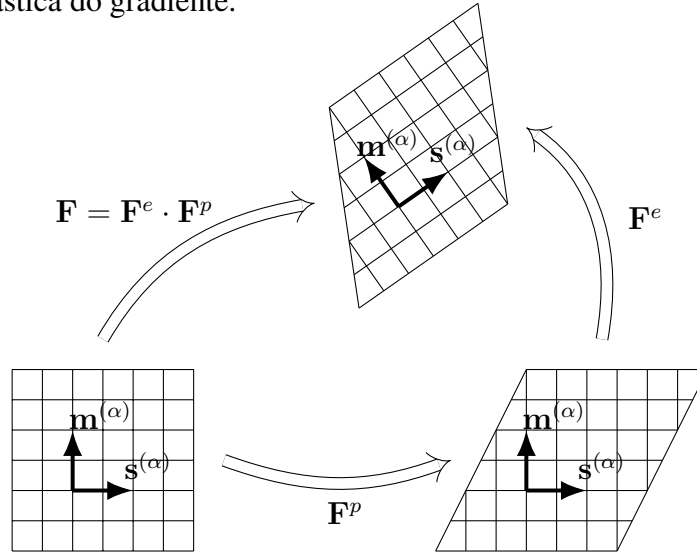


Figura 2: Decomposição do gradiente de deformações (Asaro & Rice, 1977).

Nas situações em que a distorção da rede cristalina pode ser negligenciada, assume-se a parte elástica da transformação equivalente à transformação identidade. Neste contexto somente o gradiente de deformação plástica contribui para a deformação do monocristal, logo $\mathbf{F} = \mathbf{F}^p$. Tal situação equivale à abordagem em *pequenas deformações*. Na situação de pequenas deformações utiliza-se a decomposição aditiva da deformação total, ϵ_{ij} , em uma parte elástica, ϵ_{ij}^e , e uma parte plástica, ϵ_{ij}^p ,

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^p \quad (2)$$

A fluxo de deformação plástica é relacionado com os deslizamentos nos sistemas cristalográficos α por

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_{(\alpha)} P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + m_j^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} \right) \quad (3)$$

onde $\gamma^{(\alpha)}$ representa o deslizamento plástico no sistema α e $P_{ij}^{(\alpha)}$ o tensor de orientação de Schmid para o sistema α . Na Eq. (3) $m_i^{(\alpha)}$ e $s_j^{(\alpha)}$ representam respectivamente os cossenos diretores do vetor normal ao plano e do vetor direção de deslizamento do sistema α .

2.2 Relação constitutiva cristalina

O tensor de orientação de Schmid possibilita calcular a tensão $\tau^{(\alpha)}$ resolvida no sistema cristalino α através da relação (em notação indicial)

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma_{ij} P_{ij}^{(\alpha)} \quad (4)$$

σ_{ij} é o tensor de tensões macroscópicas. Considera-se neste trabalho que o material obedece ao critério de Schmid. Segundo este critério o fluxo plástico inicia quando a tensão resolvida supera uma tensão crítica τ_{cr} . Admite-se comportamento elasto-plástico perfeito.

O campo de tensões e o campo de deformações são relacionados elasticamente pela equação

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) \quad (5)$$

onde C_{ijkl} é o tensor de Hooke. Relacionando as Eqs. (3) e (5) e resolvendo no plano cristalino a expressão fica

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \quad (6)$$

A solução do problema plástico descrito pela Eq. (6) pode ser realizada em duas etapas; um preditor elástico, onde as tensões macroscópicas σ_{ij}^E (do preditor elástico) são calculadas por $\dot{\sigma}_{ij}^E = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}$; e um retorno plástico, que corrige as tensões, satisfazendo a relação $\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)}$. Esta abordagem é chamada de *preditor-corretor*. Então

$$P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}^E - P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)} \quad (7)$$

Representando a tensão do preditor elástico resolvida nos sistemas cristalográficos por $\tau^{(\alpha),E} = P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}^E$, a Eq. (7) toma a forma

$$\dot{\tau}^{(\alpha),E} - \left(P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \right) \dot{\gamma}^{(\beta)} = 0 \quad (8)$$

ou ainda

$$\dot{\tau}^{(\alpha),E} - N_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} = 0 \quad (9)$$

O tensor $N_{\alpha\beta} = P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)}$ é o tensor constitutivo cristalino, e relaciona tensões e deformações a nível microestrutura do cristal.

Neste trabalho, assume-se que o comportamento do material é independente da taxa de deformação, então

$$d\tau^{(\alpha),E} - N_{\alpha\beta} d\gamma^{(\beta)} = 0 \quad (10)$$

ou, em notação matricial,

$$[\Delta\tau] = [N]^{-1} \cdot [\Delta\gamma] \quad (11)$$

3 SOLUÇÕES ANALÍTICAS

3.1 Modelo de Rice (1987) para trinca em monocristais sob EPD

Uma solução para campos na ponta de trincas solicitadas à tração em monocristais CFC elasto-plásticos perfeitos sob estado plano de deformações (EPD) foi proposta por Rice (1987). A solução baseia-se primeiramente em aproximação assintótica à ponta da trinca. É assumido que somente alguns sistemas de deslizamento são operantes e o fluxo plástico é baseado no critério de Schmid. A trinca é situada no plano (001) e orientada na direção $[1\bar{1}0]$ com a ponta desenvolvida na direção cristalográfica $[1\bar{1}0]$ (Fig. 3).

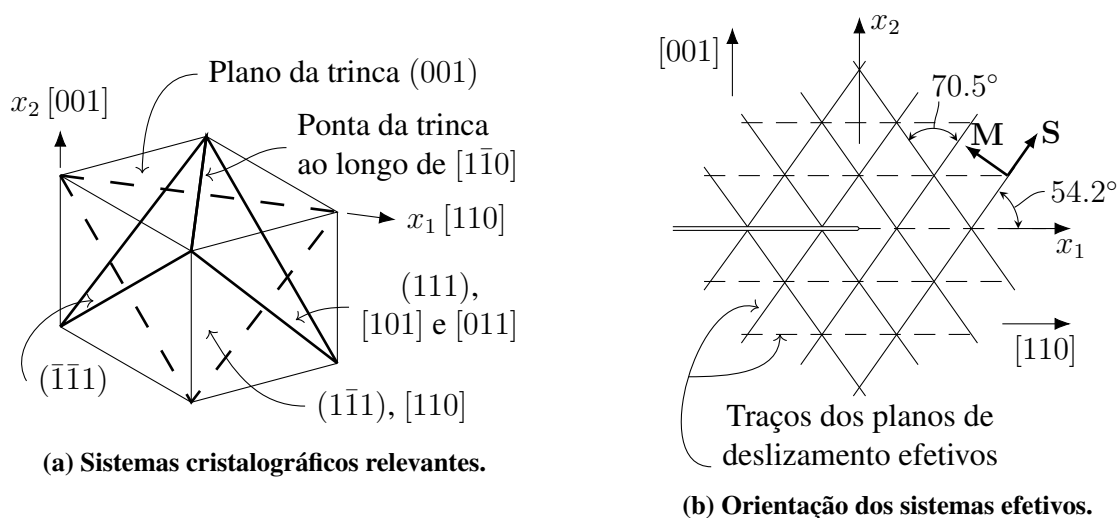


Figura 3: Orientação do plano de carregamento em relação às direções cristalográficas em monocristal CFC (Rice, 1987).

A componente ϵ_{33} do tensor de deformações é nula em EPD. Para análise perfeitamente plástica, a parte elástica ϵ_{33}^e , é restringida; logo a parte plástica $\epsilon_{33}^p = \epsilon_{33} - \epsilon_{33}^e$ também deve ser restringida na ponta da trinca em EPD. Este raciocínio leva à constatação de que deslizamentos na direção de x_3 não concordam com **grandes** deformações plásticas e portanto não devem contribuir para a singularidade na ponta da trinca. Assim, para as orientações consideradas, apenas deslizamentos nos planos (111) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}1)$ e $(11\bar{1})$ são possíveis.

Para atender a compatibilidade cinemática (e observando a simetria das células cristalinas) é assumido que o cisalhamento nos planos cristalográficos envolve quantidades idênticas e simultâneas de deslizamento em cada direção cristalográfica, de forma que componentes na direção x_3 dos deslizamentos possam se anular. Apoiando-se nesta observação, Rice introduziu o conceito de sistemas de deslizamento efetivos.

Em redes CFC deslizamentos nos planos cristalográficos (111) e $(\bar{1}\bar{1}1)$ ocorrem simultaneamente nas direções cristalográficas $[1\bar{1}0]$ e $[0\bar{1}1]$, resultando na direção efetiva de deslizamento $[1\bar{2}1]$. Sistemas que contém os planos cristalográficos $(\bar{1}11)$ e $(11\bar{1})$ correspondem ao sistema efetivo cujo plano é (010) e direção $[101]$.

Os sistemas de deslizamento efetivos são numerados conforme a Fig. 4. Na Tab. 1 é apresentada a correspondência entre sistemas de deslizamento cristalográficos e sistemas de deslizamento efetivos adotados no trabalho corrente. Para os fins desejados o sentido dos deslizamentos é dispensável. Deformações plásticas não correspondentes com os sistemas de deslizamento efetivos são desconsiderados por Rice (1987).

Sistema efetivo n.º	(1)	(2)	(3)
<i>Cristal Rice</i>	(001)[110]	($\bar{1}\bar{1}1$)[112]	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)[$\bar{1}\bar{1}2$]
Sistema cristalográfico (a)	($\bar{1}11$)[110]	($\bar{1}\bar{1}1$)[101]	(111)[$\bar{1}0\bar{1}$]
Sistema cristalográfico (b)	($1\bar{1}1$)[110]	($\bar{1}\bar{1}1$)[011]	(111)[0 $\bar{1}\bar{1}$]

Tabela 1: Correspondência entre sistemas de deslizamento cristalográficos e sistemas efetivos (adaptado de Niordson et al (2014)).

Sistema (1):

$$\mathbf{m}^{(1a)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}\right) \quad \mathbf{s}^{(1a)} = (1, 0, 0)$$

$$\mathbf{m}^{(1b)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{-2}{\sqrt{6}}\right) \quad \mathbf{s}^{(1b)} = (1, 0, 0)$$

$$\mathbf{M}^{(1)} = (0, 1, 0) \quad \mathbf{S}^{(1)} = (1, 0, 0)$$

Sistema (3):

$$\mathbf{m}^{(2a)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{s}^{(2a)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\mathbf{m}^{(2b)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{s}^{(2b)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{-1}{2}\right)$$

$$\mathbf{M}^{(2)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{S}^{(2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, 0\right)$$

Tabela 2: Vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos (1) e (2) para o cristal CFC.

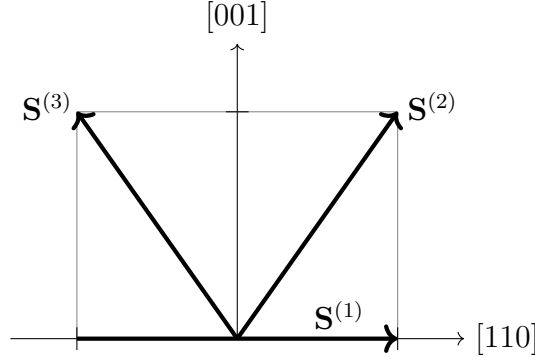


Figura 4: Numeração adotada para os sistemas de deslizamento efetivos.

3.2 Tensão crítica dos sistemas efetivos

Seja o sistema efetivo (α) relacionado com dois sistemas cristalográficos (αa) e (αb) , ambos com tensão crítica τ_{cr} . A condição de escoamento para os sistemas cristalográficos é

$$m_{\mu}^{(\alpha a)} \sigma_{\mu\nu} s_{\nu}^{(\alpha a)} = \pm \tau_{cr}$$

com μ, ν tomando os valores 1 e 2. Então, é possível escrever a condição de escoamento para o sistema efetivo correspondente como

$$M_{\mu}^{(\alpha)} \sigma_{\mu\nu} S_{\nu}^{(\alpha)} = \pm \tau_{cr}^{(\alpha)} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_{cr} \quad (12)$$

na qual $\beta^{(\alpha)}$ é uma constante de correção esperada existir. É fácil perceber que

$$\beta^{(\alpha)} = \frac{2 M_{\mu}^{(\alpha)} S_{\nu}^{(\alpha)}}{m_{\mu}^{(\alpha a)} s_{\nu}^{(\alpha a)} + m_{\mu}^{(\alpha b)} s_{\nu}^{(\alpha b)}} \quad (13)$$

para qualquer μ, ν . Na Tab. 2 são apresentados os vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos relevantes para um cristal CFC.

Se aplicados os valores da Tab. 2 na equação 13 (e observando a simetria dos sistemas (2) e (3)), implica que $\beta^{(1)} = \sqrt{3}$ e $\beta^{(2)} = \beta^{(3)} = \frac{2}{\sqrt{3}}$.

3.3 Superfície de escoamento

Rice (1987) demonstrou que sólidos rígido-plásticos incompressíveis de **anisotropia arbitrária** que cumprem com o *princípio do máximo trabalho plástico* (respeitam uma regra de fluxo associada) sob estado plano de deformações atendem a um critério de escoamento reduzido dependente apenas das tensões desviadoras $(\sigma_{11} - \sigma_{22})/2$ e σ_{12} . Ou seja, são excluídas as tensões *fora do plano* e, conseqüentemente, a tensão média no plano $\sigma = (\sigma_{11} + \sigma_{22})/2$. Gráficamente isto significa que o critério é equivalente a um **único** contorno convexo no plano de tensões de Mohr definido pelas tensões desviadoras.

Fundamentando-se nessa constatação, Rice construiu a superfície de escoamento para o modelo de cristais em EPD como o contorno poligonal no plano $\left\{ \frac{(\sigma_{11} - \sigma_{22})}{2}, \sigma_{12} \right\}$ apresentado na Fig. 5.

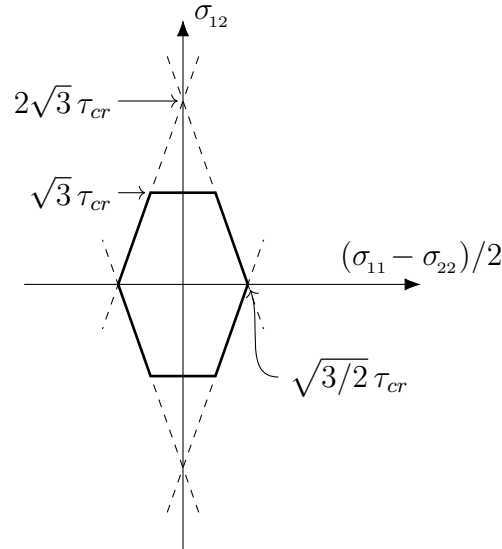


Figura 5: Superfície de escoamento para um cristal CFC em EPD (adaptado de Rice (1987)).

Desenvolvendo a Eq. 12 e observando que $S_1^{(\alpha)} = M_2^{(\alpha)}$ e $S_2^{(\alpha)} = -M_1^{(\alpha)}$, fica

$$2 M_1^{(\alpha)} M_2^{(\alpha)} \frac{(\sigma_{11} - \sigma_{22})}{2} + \left(M_2^{(\alpha)} M_2^{(\alpha)} - M_1^{(\alpha)} M_1^{(\alpha)} \right) \sigma_{12} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_{cr}$$

na qual aplicando para o sistema (α) o respectivo valor de $\beta^{(\alpha)}$ obtém-se as retas da superfície poligonal da Fig. 5.

3.4 Equilíbrio de tensões na forma assintótica

Sejam r e θ coordenadas polares centradas na ponta da trinca, então $x_1 = r \cos \theta$ e $x_2 = r \sin \theta$ conforme a Fig. 3b. O vetor unitário radial no plano $\{x_1, x_2\}$ é $e_\mu(\theta) = \frac{\partial r}{\partial x_\mu}$ (com $(e_1, e_2) = (\cos \theta, \sin \theta)$) e $e'_\mu \equiv \frac{de_\mu}{d\theta}$ é o vetor unitário na direção do aumento de θ . Então $e'_\mu = r \frac{\partial \theta}{\partial x_\mu}$ e $e'_\mu e_\mu = 0$.

As equações de equilíbrio ficam

$$\frac{\partial \sigma_{\mu\nu}}{\partial x_\mu} = \left(\frac{\partial \sigma_{\mu\nu}}{\partial r} \right) e_\mu + \left(\frac{\partial \sigma_{\mu\nu}}{\partial \theta} \right) \frac{e'_\mu}{r} = 0 \quad (14)$$

Para um material não endurecível, $r \frac{\partial \sigma_{\mu\nu}}{\partial r} \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow 0$; assintoticamente a equação de equilíbrio implica

$$e'_\mu \sigma'_{\mu\nu} = 0, \quad \sigma'_{ij} = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial \sigma_{ij}(r, \theta)}{\partial \theta} \right] = \sigma'_{ij}(\theta)$$

A simetria de $\sigma'_{\mu\nu}$ e $e'_\mu e_\mu = 0$ implicam que $\sigma'_{\mu\nu} \propto e_\mu e_\nu$. É possível demonstrar que

$$\sigma'_{\mu\nu} = e_\mu e_\nu (\sigma'_{11} + \sigma'_{22}) \quad (15)$$

Supondo que em algum setor particular na ponta da trinca o estado de tensões está sobre a superfície de escoamento. Como vale a Eq. 12, então $M_\mu^{(\alpha)} \sigma'_{\mu\nu} S_\nu^{(\alpha)} = 0$ no interior do setor. Pela Eq. 15 então

$$(M_\mu^{(\alpha)} e_\mu) (S_\nu^{(\alpha)} e_\nu) (\sigma'_{11} + \sigma'_{22}) = 0 \quad (16)$$

Para todo θ , exceto os quatro valores para qual e é colinear a $M^{(\alpha)}$ ou $S^{(\alpha)}$, $\sigma'_{11} + \sigma'_{22} = 0$. Da Eq. 15 implica que $\sigma'_{\mu\nu} = 0$ e, então, $\sigma_{\mu\nu}$ é constante internamente aos setores circulares.

Para uma trinca sob tração, $\sigma_{22} \neq 0$ em $\theta = 0$, e um campo com $\sigma_{\mu\nu}$ constante para todo θ em torno da ponta não pode satisfazer as condições de contorno na superfície da trinca. Logo, Rice (1978) conclui que (i) as tensões em algum setor particular não estão sobre a superfície de escoamento, ou (ii) as tensões mudam descontinuamente em certos ângulos θ (possivelmente aqueles nos quais e é colinear a $M^{(\alpha)}$ ou $S^{(\alpha)}$). Em favor de uma alta triaxialidade Rice (1987) buscou soluções na forma de (ii) para trinca estacionária.

3.5 Campos na ponta da trinca

A solução proposta para trinca estacionária consiste em fluxo plástico ocorrendo em todos os ângulos em torno da ponta da trinca porque, segundo o autor, considerações de análise limite indicam que este tipo de solução é o que proporciona maior triaxialidade. Nas considerações a seguir $\llbracket f \rrbracket = f(\theta^+) - f(\theta^-)$.

Distribuição de tensões Supondo que em uma direção radial e $\llbracket \sigma_{\alpha\beta} \rrbracket$ é não nulo. Pela continuidade do vetor tração implica em $e'_\alpha \llbracket \sigma_{\alpha\beta} \rrbracket = 0$, e então

$$\llbracket \sigma_{\alpha\beta} \rrbracket = e_\alpha e_\beta \llbracket \sigma_{11} + \sigma_{22} \rrbracket \quad (17)$$

Como é procurada uma solução com escoamento em todos os ângulos em torno da ponta da trinca é necessário que as descontinuidades correspondam às retas entre dois pontos a tensões constantes sobre a superfície de escoamento. A correspondência entre uma linha de descontinuidade no espaço das tensões e um sistema de deslizamento (α) implica que a contração $M_\mu^{(\alpha)} \sigma_{\mu\nu} S_\nu^{(\alpha)} = 0$ é igual em ambos os lados da descontinuidade, logo

$$M_\mu^{(\alpha)} S_\nu^{(\alpha)} \llbracket \sigma_{\mu\nu} \rrbracket = (M_\mu^{(\alpha)} e_\mu) (S_\nu^{(\alpha)} e_\nu) \llbracket \sigma_{11} + \sigma_{22} \rrbracket = 0 \quad (18)$$

Então, uma descontinuidade é possível quando e é colinear a $M^{(\alpha)}$ ou $S^{(\alpha)}$. Assim, uma descontinuidade no campo de tensões correspondente a atividade plástica em uma certa família de sistemas de deslizamento deve existir ao longo do membro da família passando pela ponta da trinca ou ao longo de uma linha perpendicular através da ponta. Em uma descontinuidade o estado de tensões deve variar de vértice a vértice na superfície de escoamento, caso contrário uma nova descontinuidade somente seria possível após uma variação em 90° , o que impossibilitaria a construção da solução.

Através da Eq. 17 é possível demonstrar que

$$\llbracket \frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \rrbracket = -\llbracket L \rrbracket, \quad \llbracket L \rrbracket^2 = \llbracket \sigma_{12} \rrbracket^2 + \llbracket \frac{1}{2}(\sigma_{11} - \sigma_{22}) \rrbracket^2 \quad (19)$$

onde L é o comprimento de arco em torno da superfície de escoamento, crescendo na direção $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$ na Fig. 6.. A primeira das Eqs. 19 pode ser reescrita na forma

$$\frac{1}{2} (\sigma_{11}(\theta^-) + \sigma_{22}(\theta^-)) = \frac{1}{2} (\sigma_{11}(\theta^+) + \sigma_{22}(\theta^+)) + \llbracket L \rrbracket \quad (20)$$

Para o setor D, a condição de contorno na ponta da trinca exige $\sigma_{22}^D = 0$. Assim, através da Eq. 20 e da superfície de escoamento Rice (1987) construiu o campo de tensões da Fig. 6.

Stationary Crack

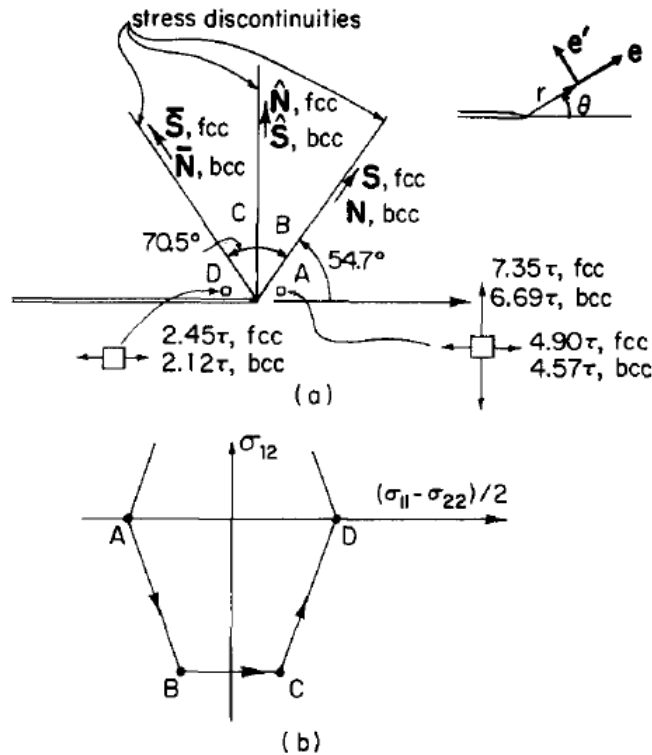


Figura 6: Campo de tensões para trinca estacionária (Rice, 1987).

Distribuição de deformações e descontinuidades nos deslocamentos Fora das regiões descontínuas, o estado de tensões está em algum vértice da superfície de escoamento, ou seja, duas das três família de sistemas de deslizamento estão simultaneamente sob deformação plástica. Sejam duas famílias (α) e (β) a taxa de deformação plástica é da forma

$$\dot{\epsilon}_{\mu\nu}^p = \Lambda^{(\alpha)} (M_{\mu}^{(\alpha)} S_{\nu}^{(\alpha)} + M_{\nu}^{(\alpha)} S_{\mu}^{(\alpha)}) + \Lambda^{(\beta)} (M_{\mu}^{(\beta)} S_{\nu}^{(\beta)} + M_{\nu}^{(\beta)} S_{\mu}^{(\beta)}) \quad (21)$$

onde os Λ 's são os módulos. Em uma descontinuidade no campo de tensões, o par de sistemas $(\alpha), (\beta)$ sob deformação plástica muda para $(\beta), (\gamma)$, e o raio em que isto ocorre é colinear a $M^{(\beta)}$ ou $S^{(\beta)}$.

Então a solução derivada por Rice (1987) não pressupõem somente corte na direção dos planos de deslizamento mas também ortogonal a estes (bandas "kink-shear").

3.6 Soluções de Drugan (2001)

Baseando-se na constatação de que bandas "kink-shear" não são evidenciadas em diversos experimentos e simulações numéricas de deformação plástica na ponta de trinca em monocristais, Drugan (2001) procurou soluções para o modelo de Rice (1987) desconsiderando a possibilidade de corte ortogonal aos planos de deslizamento.

Para garantir a elevada triaxialidade na construção dos campos, Drugan (2001) baseou-se nos experimentos Crone & Shield (2001) e simulações em discordâncias discretas de Van der Giessen et al (2001). Os resultados de ambos autores concordam com os resultados de Rice (1987) para $0 < \theta < 90^\circ$ e que o estado de tensões da região B de Rice (1987) (Fig. 6) persiste além de $\theta = 90^\circ$. Também ambos não apresentam a evidência de presença do estado C, nem deformação plástica concentrada no raio de $\theta = 90^\circ$. Também sugerem a existência de um setor elástico entre as Regiões B e D.

Assim, para concordar com estes resultados, é necessário também um conjunto de equações que descreva setores com comportamento elástico em torno da ponta da trinca. Em material com resposta elástica isotrópia (o caso considerado aqui), a equação de compatibilidade de tensões no plano é

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) (\sigma_{11} + \sigma_{22}) = 0 \quad (22)$$

A Eq. 22 é aplicável tanto a setores abaixo do escoamento quanto a setores cujo campo de deformações plásticas seja independente ou varie linearmente com a posição. Multiplicando a Eq. 22 por r^2 , tomando o limite $r \rightarrow 0$ chega-se a

$$(\sigma_{11} + \sigma_{22})'' = 0 \Rightarrow \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2 \tau_{cr}} = C_1 + 2 C_2 \theta \quad (23)$$

e, com as Eqs. 15, 22 e 23 o campo de tensões em um setor elástico próximo a ponta da trinca é descrito pelas equações

$$\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{2 \tau_{cr}} = C_2 \sin 2\theta + C_4 \quad (24)$$

$$\frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2 \tau_{cr}} = C_1 + 2 C_2 \theta \quad (25)$$

$$\frac{\sigma_{12}}{\tau_{cr}} = -C_2 \cos 2\theta + C_3 \quad (26)$$

onde C_1 a C_4 são constantes a serem determinadas.

Com as Eqs. 24 a 21 para garantir a continuidade das tensões nos setores elásticos e aplicando as condições de contorno na trinca, Drugan (2001) demonstra três possíveis configurações de campos na ponta da trinca, resultando em diferentes valores para os ângulos θ_2 e θ_3 , apresentados nas Tab. 3, 4 e 5 referentes a Fig. 7.

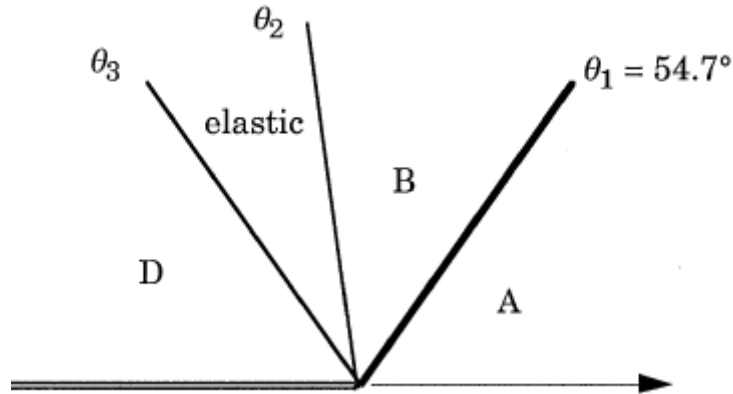


Figura 7: Forma do campo de tensões na ponta da trinca de um monocristal CFC com impedimento ao "kink-shear"(Drugan, 2001).

Sector	σ_{22}/τ_{cr}	σ_{11}/τ_{cr}	σ_{12}/τ_{cr}
A	6.90598	4.45949	0
B	4.45949	3.23475	-1.73205
D	0	2.44949	0

Tabela 3: Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Fig. 7 com $\theta_2 = 98.0495^\circ$ e $\theta_3 = 125.264^\circ$ (Drugan, 2001).

Sector	σ_{22}/τ_{cr}	σ_{11}/τ_{cr}	σ_{12}/τ_{cr}
A	6.81148	4.36199	0
B	4.36199	3.13725	-1.73205
D	0	2.44949	0

Tabela 4: Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Fig. 7 com $\theta_2 = \theta_3 = 111.675^\circ$ (Drugan, 2001).

Sector	σ_{22}/τ_{cr}	σ_{11}/τ_{cr}	σ_{12}/τ_{cr}
A	7.03106	4.58157	0
B	4.58157	3.35683	-1.73205
D	0	2.44949	0

Tabela 5: Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Fig. 7 com $\theta_2 = 90^\circ$, $\theta_3 = 125.264^\circ$ e um salto de tensão através da descontinuidade $\theta_3 = 125.264^\circ$ (Drugan, 2001).

4 EXEMPLO NUMÉRICO

A fim de verificar a concordância da relação constitutiva apresentada na Eq. 4 com resultados analíticos é proposto um modelo de tira metálica com trinca de aresta solicitada à tração em estado plano de deformações (Fig. 8).

Para as condições propostas por Rice (1987), introduz-se os vetores de direção do planos efetivos e das direções efetivas para um sistema β , respectivamente $\mathbf{M}^{(\beta)}$ e $\mathbf{S}^{(\beta)}$, como

$$\mathbf{M}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta + \pi/2) \\ \sin(\theta_\beta + \pi/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta) \\ \sin(\theta_\beta) \end{pmatrix}$$

θ_β é o ângulo do sistema efetivo em relação ao sentido positivo do eixo x_1 . É possível demonstrar que neste caso a relação constitutiva cristalina fica

$$N_{\alpha\beta} = \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta) \quad (27)$$

onde μ é o módulo de cisalhamento.

Como ferramenta de discretização é utilizado o método dos elementos finitos (EF). Devido a simetria utiliza-se metade da altura l da tira como domínio de EF. As condições de contorno de deslocamentos são zona livre de restrições na região da trinca, anteriormente à ponta (região de comprimento a); e restrições aos deslocamentos no plano na região posterior a ponta da trinca (região de comprimento $\frac{l}{2} - a$).

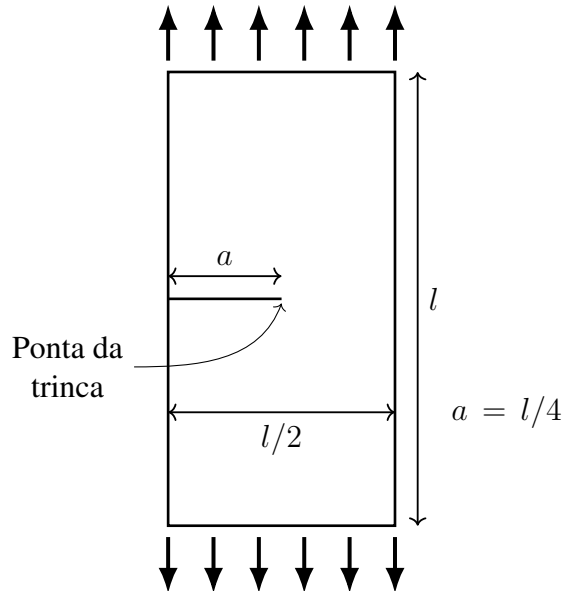


Figura 8: Modelo para trinca sob tração em EPD. As dimensões relativas estão descritas na figura.

A malha possui 9248 elementos retangulares bilineares, distribuídos com maior densidade na ponta da trinca. São utilizadas para os sistemas efetivos $\tau_{cr}^{(1)} = 60$ e $\tau_{cr}^{(2)} = \tau_{cr}^{(3)} = 40$, resultando em uma tensão crítica $\tau_{cr} \approx 34.64$ para o cristal.

4.1 Resultados

Os resultados para o campo de tensões são mostrados nas Fig. 10 e 9.

Na Fig. 9 é possível observar uma zona de ausência de atividade plástica indicada na cor verde. Isto indica que os resultados numéricos seguem mais próximo aos campos de tensões da solução de Drugan (2001) (Fig. 7) do que da solução de Rice (1987) (Fig. 6).

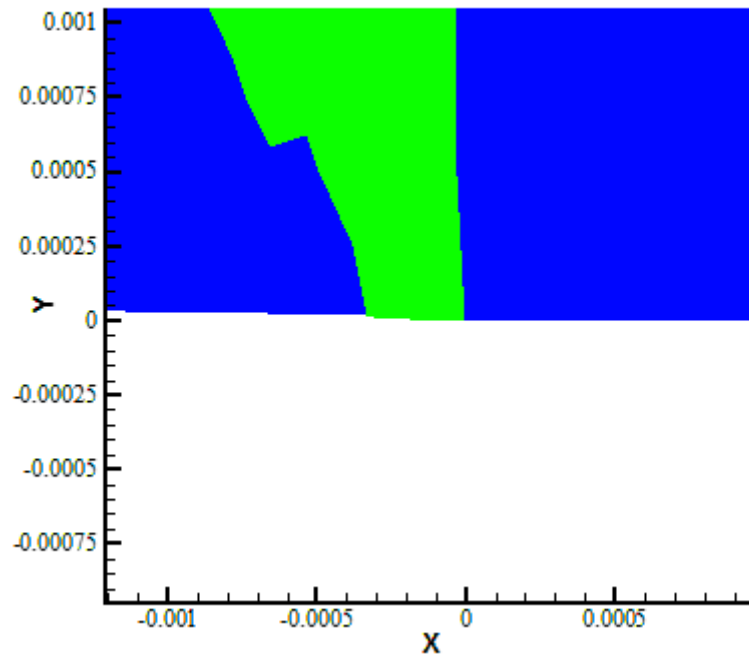


Figura 9: Mapa de atividade plástica na ponta da trinca. Regiões em verde referem-se a comportamento elástico e regiões em azul a comportamento plástico.

As zonas A, B e D da Tab. 3 são representadas aproximadamente pelos resultados numéricos como pode-se ver na Fig. 10.

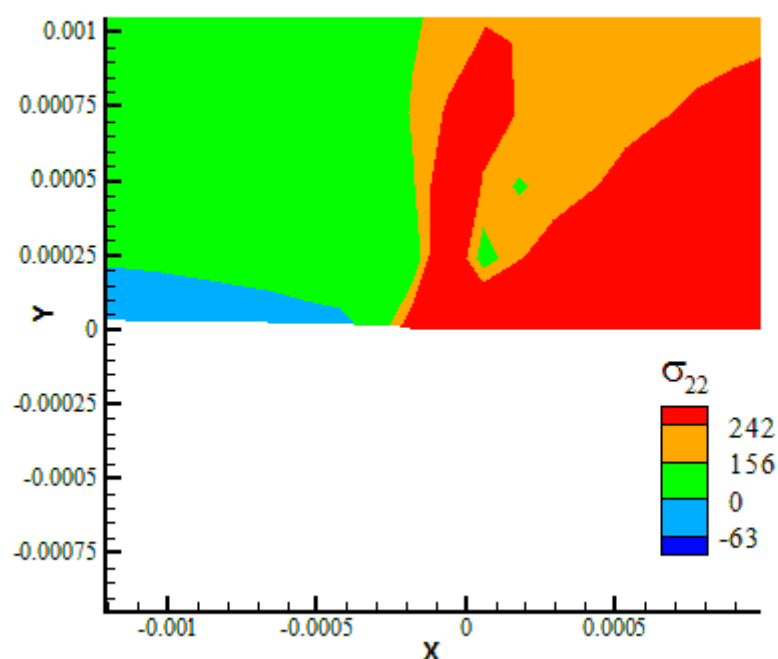


Figura 10: Mapa de isovalores da tensão σ_{22} na ponta da trinca.

5 CONCLUSÃO

Foram considerados soluções analíticas para o campo de tensões na ponta de trincas em monocristais em EPD com comportamento elasto-plástico perfeito. Tais modelos consideram aproximação assintótica à ponta da trinca de Rice. O modelo de Rice (1987) compreende deformação plástica tanto paralelamente aos planos cristalinos quanto ortogonal a estes, formando bandas "kink-shear". Foram também apresentadas as soluções de Drugan (2001), nas quais é impedida a formação de tais bandas. Um modelo numérico de plasticidade cristalina foi desenvolvido de modo a capturar a anisotropia característica da microestrutura dos cristais. Foi observado uma boa correspondência de resultados principalmente com o modelo de Drugan (2001).

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio do Governo Brasileiro através de bolsas do CNPq e CAPES.

REFERÊNCIAS

- Asaro, R. J., & Rice, J. R., 1977. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25(5), 309-338.
- Crone, W. C., & Shield, T. W. (2001). Experimental study of the deformation near a notch tip in copper and copper-beryllium single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(12), 2819-2838.

Drugan, W. J., 2001. Asymptotic solutions for tensile crack tip fields without kink-type shear bands in elastic-ideally plastic single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9), 2155-2176.

Hirth, J. P., & Lothe, J., 1982. *Theory of dislocations*.

Niordson, C. F., & Kysar, J. W., 2014. Computational strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 62, 31-47.

Rice, J. R., 1987. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mechanics of Materials*, 6(4), 317-335.

Van der Giessen, E., Deshpande, V. S., Cleveringa, H. H. M., & Needleman, A., 2001. Discrete dislocation plasticity and crack tip fields in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9), 2133-2153.