

JOÃO SANDOVAL BITTENCOURT DE OLIVEIRA

SIMULAÇÃO POR COMPUTADOR DO MOVIMENTO
DE UMA LINHA DE DISLOCAÇÃO ATRAVÉS DE
UM ARRANJO ESPACIAL DE PRECIPITADOS

Tese apresentada ao Instituto
de Física "Gleb Wataghin" da
Universidade Estadual de Cam
pinas, para obtenção do Títu
lo de Doutor.

I F G W

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Campinas - SP

1 9 8 0

À minha mãe e a memória de
meu pai e irmão falecidos.

À minha esposa e filhos.

A concretização desta tese foi possível graças à:
Universidade Federal do Pará e em especial ao seu Departamento de Física.
Universidade Estadual de Campinas, através do Instituto de Física "Gleb Wataghin".
Coordenação do Aperfeiçoamento do Pessoal de Nível Superior, através do Plano Institucional de Capacitação de Docentes.
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.
Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo.

Í N D I C E

Índice da figuras.	1
Agradecimentos.	4
Resumo.	5
Prefácio.	7
1. Introdução.	9
1.1 Objetivo do trabalho.	9
1.2 Trabalhos desenvolvidos recentemente.	9
1.3 Comentários sobre o modelo proposto.	11
1.4 Revisão da Teoria da Elasticidade.	13
1.4.1 Tensão.	13
1.4.2 Deformação.	17
1.4.3 Forças sobre uma dislocação.	19
2. Fundamentos teóricos (Influência de precipitados na tensão de fluxo).	24
2.1 Endurecimento por precipitação.	26
2.2 Interação entre precipitados e dislocação.	31
2.3 Tensão de linha.	37
3. Métodos de simulação.	43
3.1 Comentários sobre a distribuição aleatória dos precipitados.	43
3.2 Comentários sobre a simulação da tensão de fluxo.	45

3.3	Comentários sobre a simulação do movimento da dislocação.	49
4.	Técnicas de computação.	53
5.	Interpretação dos resultados.	60
6.	Discussão.	66
7.	Conclusões.	70
	Referências bibliográficas.	71
	Apêndice.	98

Í N D I C E D A S F I G U R A S

Figura		Página
1	Representação esquemática de precipitados que surgem em deformações coerentes.	75
2	Campo interno típico a ser vencido pela dislocação móvel, sob a ação de uma tensão aplicada	76
3	Movimento de uma dislocação através de um arranjo espacial de obstáculos - aspectos da configuração geométrica.	77
4	Mecanismo proposto por Orowan para explicar a passagem da dislocação através de obstáculos rígidos largamente espaçados.	78
5	Campo dos deslocamentos devido a introdução de um obstáculos com simetria esférica na matriz.	79
6	Ação do campo elástico gerado por um precipitado sobre uma dislocação localizada nas suas vizinhanças.	80
7	Tensão de linha de uma dislocação encurvada.	81
8	Dislocação encurvada. O vetor de Burgers forma um ângulo θ com a configuração reta original.	82
9	Aspecto da configuração assumida pela dislocação no plano do deslizamento, sob a ação da tensão atuante.	83

Figura	2 Página
10 Distribuição ordenada de precipitados usada no cálculo de $\bar{\sigma}_i$.	84
11 Interpretação geométrica do método empregado na simulação do movimento da dislocação.	85
12 Condições de contorno empregadas nos cálculos da simulação - Imagem especular.	86
13 Interpretação geométrica do primeiro método idealizado para simular o movimento de dislocação.	87
14 Interpretação geométrica de um outro método usado no estudo do movimento da dislocação.	88
15 Aspecto gráfico da variação da relação t/t_i em função de t_i para a dislocação de cunha.	89
16 Configurações estáveis assumidas pela dislocação para distintos valores de t_i , no caso de uma dislocação com características iniciais de cunha.	90
17 Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de Cu-Co, com concentrações de 3.0%, 4.0% e 6.0%, para o caso de dislocações de cunha.	91
18 Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de Al-Zn, com concentrações de 1.4% e 2.0%, para o caso de dislocações de cunha.	92
19 Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de $\text{Cu}_3\text{Au-Co}$,	

Figura

- com concentração de 1.5% para estruturas ordenadas (O) e desordenadas (D), para o caso de dislocações de cunha. 93
- 20 Comparação de resultados simulados com da dos experimentais para ligas de $\text{Cu}_3\text{Au-Co}$, com concentração de 1.6% para estruturas ordenadas(O) e desordenadas(D), para o ca so de dislocações de cunha. 94
- 21 Normalização dos dados experimentais à curva padrão dos resultados simulados. 95
- 22 Configurações estáveis assumidas pela dis locação de hélice para distintos valores de t_i . 96
- 23 Aspecto gráfico da variação da relação $-t/t_i$ em função de t_i , para a dislocação - de hélice. 97

A G R A D E C I M E N T O S

À Universidade Federal do Pará e seu Departamento de Física por haverem consentido no meu afastamento para cursar o doutoramento em Física.

Ao Prof. Dr. Ricardo Enrique Mederano pela amizade, orientação e apoio constantes.

Ao Prof. Dr. Gunther Schoeck pelas valiosas discussões e sugestões dadas durante a elaboração deste trabalho.

À Anunciada, minha mulher, pela paciência e incentivos dados.

Ao Prof. Dr. Antonio Fernando dos Santos Penna pela leitura do manuscrito.

Aos analistas do Centro de Computação de IFGW pelo auxílio na parte de computação.

À Secretaria do Departamento de Física Aplicada e à Secretaria de Apoio do IFGW pelas atenções dispensadas.

À Seção de Desenho do IFGW pela confecção das figuras.

Ao pessoal do serviço de publicação do IFGW pelo trabalho de impressão

À todas as pessoas que direta ou indiretamente colaboraram para a conclusão deste trabalho.

R E S U M O

É simulada a tensão de fluxo para materiais sólidos cristalinos com precipitados em termos de um modelo baseado na interação entre os campos elásticos da dislocação e dos precipitados. Na determinação das forças que atuam sobre a dislocação flexível que se movimenta através de um arranjo aleatório de precipitados é considerada a forma geométrica de sua configuração. A distribuição aleatória é obtida dividindo o espaço em células e introduzindo no interior de cada uma delas um precipitado numa posição ao acaso. Várias distribuições espaciais são estudadas para dislocações com características iniciais de cunha e de hélice. A comparação entre resultados simulados e dados experimentais revelou bom acordo.

Um dos aspectos positivos do trabalho é a obtenção de um diagrama padrão para a tensão de fluxo com respeito ao raio médio dos precipitados, o qual é **independente** das características químicas e físicas dos átomos de soluto e da matriz. Além disso, o diagrama pode ser usado para uma larga faixa de dimensões dos precipitados bem como para um grande número de distintas concentrações de soluto.

A B S T R A C T

The yield stress of crystals with precipitates is simulated in terms of a model based upon the interaction between elastic field of dislocation and precipitates. In determining the strength action upon flexible dislocation, which moves itself through a spatial array of precipitates, it was considered the geometrical form of its configuration. The random distribution of precipitates may be obtained by dividing the space in cells and positioning randomly one precipitate in each cell. Many different spatial configurations of precipitates are studied for edge and screw dislocations. A comparison between the simulated results and the experimental data has been made and it was found good agreement.

A positive feature of this work is to obtain pattern diagram for yield stress with respect to the mean radius of precipitates which is independent of the chemical and physical characteristics of the solute atoms and matrix. Further, the diagram may be used in the wide band of precipitates dimensions and to large range of different solute concentrations.

P R E F Á C I O

As interações elásticas entre dislocações e fontes de deformações internas, tais como outras dislocações ou precipitados, são de fundamental importância para muitas das propriedades dos sólidos cristalinos. No presente trabalho é estudada apenas a interação elástica com precipitados, pelo movimento simulado de uma dislocação flexível através de um arranjo espacial daquelas partículas, sob a influência da tensão de linha.

No primeiro capítulo, é feita a descrição e a análise sucintas dos métodos recentes usados por alguns pesquisadores, no estudo do fluxo plástico simulado. Em seguida são expostas as idéias básicas do modelo proposto, o qual tem a pretensão de tornar mais realista a simulação da tensão de fluxo. O capítulo é encerrado com uma revisão de alguns conceitos relevantes da Elasticidade dos Meios Contínuos.

No segundo capítulo, faz-se o estudo mais detalhado dos fatores que influenciam mais fortemente a resistência ao deslizamento da dislocação. São destacados como tais a força originada da interação com os precipitados e a força devida ao encurvamento da dislocação no interior do campo interno de tensões. É também incluída toda a formulação matemática para a sua compreensão.

O terceiro capítulo apresenta o método de simulação desenvolvido. O estudo do comportamento da dislocação

ção dentro do campo de tensões geradas pelos precipitados é realizado em função de dois parâmetros adimensionais, normalizadores da força aplicada externamente ao sólido e da força de interação com os precipitados. Este fato resulta em grande importância para o trabalho, pois isto permite fazer uma simulação da tensão de fluxo, única para uma larga faixa de dimensões dos precipitados bem como para um número bem grande de distintas concentrações de solutos.

Nos dois capítulos seguintes é feita a apresentação dos resultados obtidos e suas discussões em termos de dados experimentais constantes em literaturas recentes.

O último capítulo é dedicado às conclusões dos resultados obtidos.

As referências bibliográficas estão colocadas após o último capítulo e logo em seguida as figuras.

Por fim é apresentado um apêndice com os programas de computação utilizados nos cálculos da simulação.

Capítulo 1

I N T R O D U Ç Ã O

1.1 Objetivo do trabalho

O campo das deformações elásticas gerado por precipitados num sólido cristalino desempenha um papel muito importante na determinação das propriedades mecânicas dos metais. Esta pesquisa tem por objetivo o estudo da forma como a interação entre tais campos e o de uma dislocação móvel influencia a tensão de fluxo e o modo pelo qual ela pode ser determinada teoricamente, a partir de um modelo bem mais próximo da realidade física do fenômeno.

1.2 Trabalhos desenvolvidos recentemente

Um grande número de simulações tem sido feito para o estudo do movimento de uma dislocação através de um arranjo espacial de obstáculos. Na maioria dos casos a interação entre a dislocação e os obstáculos tem sido representada por uma força pontual⁽¹⁾. Quando os obstáculos são átomos solutos ou precipitados esta descrição não é realista. Muitas tentativas foram feitas para melhorar a simulação. Labusch e Schwarz⁽²⁾ consideraram um arranjo planar de obstáculos fracos com largura finita, porém utilizaram um

potencial do tipo senoidal para representar a interação entre eles e a dislocação.

Para a maioria dos átomos de soluto e muitos precipitados, uma característica comum é que eles podem ser representados elasticamente como centros de dilatação, os quais interagem com a dislocação através do seu próprio campo de tensões. Partindo deste princípio Kuo e Arsenault⁽³⁾ fizeram a simulação do movimento da dislocação considerando apenas a força de interação de um arranjo espacial de centros de dilatação sobre um segmento reto de dislocação de cunha com comprimento finito, para o caso de uma solução sólida.

Partindo de argumentos teóricos Labusch⁽⁴⁾ demonstrou que a dependência da tensão de fluxo sobre a concentração de obstáculos está ligada à própria extensão desses obstáculos. Este fato despertou o interêsse de fazer uma simulação mais realista para a resistência ao deslizamento de uma dislocação flexível, através de um arranjo espacial de obstáculos extensos.

De um modo geral a largura de um obstáculo , introduzida como um parâmetro na descrição analítica da tensão de fluxo, fica completamente determinada pela natureza da interação do próprio obstáculo com a dislocação. No caso de precipitados, eles deformam localmente a rede cristalina gerando campos de tensões elásticas de curto alcance que interferem de modo resistivo no movimento da dislocação em certas regiões do interior da matriz. Consequentemente, cada centro de dilatação define uma região de influência no interior da qual os átomos de soluto precipitaram. Uma descrição realista desta situação pode ser obtida a partir da divisão do espaço em células e uma posterior introdução

no interior de cada uma delas, de um precipitado numa posi
ção aleatória.

1.3 Comentários sobre o modelo proposto.

No presente trabalho é estudado o movimento de uma dislocação flexível, com tensão de linha dependente da orientação do vetor de Burgers. O movimento é realizado o através de um arranjo espacial de precipitados, sob a ação de uma tensão aplicada externamente ao conjunto.

O arranjo espacial de precipitados é obtido a partir da construção de uma estrutura de 600 células dispostas num conjunto de 10 células na direção X, 20 na direção Y e 3 células na direção Z, todas com mesmas dimensões e contendo apenas um precipitado numa posição ao acaso no seu interior. A simulação do movimento é feita considerando inicialmente a dislocação como uma linha reta, paralela ao eixo X e colocada no centro do arranjo. A linha de dislocação é então dividida em um determinado número de iguais segmentos. Em seguida calcula-se a força atuante nos extremos de cada um desses segmentos, devida exclusivamente ao campo de tensões internas (dos precipitados) e a dislocação é deixada livre para se movimentar sobre o plano formado pelos eixos X - Y, ao longo da direção Y até atingir uma configuração de equilíbrio sob a influência da tensão de linha. A partir de então, é adicionada uma força aplicada e nova configuração de equilíbrio é calculada, empregando um método de computação que dá mais rápida convergência que os outros métodos tentados e usando como condições de contorno periódicas nos extremos da linha de dislocação, sua imagem especular. A força aplicada é então aumentada discretamente e

novas configurações estáveis são determinadas até a dislo
cação adquirir condições para vencer os obstáculos que impe
dem o seu movimento. Esta é a tensão de fluxo simulada.

A distribuição espacial de precipitados é es
tudada para dislocações com características iniciais de cu
nha e de hélice. Esta distribuição representativa de uma ma
triz com átomos de soluto completamente precipitados, permi
te que se faça o crescimento desses precipitados entre limi
tes fisicamente aceitáveis. Este é um dos aspectos positi
vos de se incluir na descrição analítica do processo da de
formação plástica simulada a largura dos obstáculos. Isto
torna possível a normalização tanto da tensão de fluxo como
a das dimensões dos precipitados, fazendo com que os parâme
tros da simulação fiquem independentes das características
químicas e físicas dos elementos que formam os precipitados
e a matriz. Com isso, uma grande variedade de ligas poderão
ser simuladas, com distintas concentrações de átomos de so
luto e para cada uma delas será possível reproduzir o fenô
meno do envelhecimento, em termos das dimensões dos precipi
tados.

Os resultados obtidos na simulação mostram a
existência de uma única curva padrão, a qual comparada com
dados experimentais, devidamente normalizados aos parâmetro
s da simulação, acusou bom acordo.

Por outro lado, algumas limitações são impos
tas ao modelo, tais como a de que os precipitados tenham di
mensões iguais embora variáveis, todos com mesma simetria es
férica; que a linha de dislocação durante seu movimento na
matriz mantenha uma configuração não muito afastada da con
figuração inicialmente reta. No entanto, como estas limita

ções não são mais restritivas que as utilizadas por outros pesquisadores⁽¹⁻⁴⁾, parece razoável considerar este trabalho como representativo do comportamento de uma dislocação no interior de um sólido cristalino com partículas precipitadas.

1.4 Revisão da Teoria da Elasticidade

Nesta parte é feita a revisão de três conceitos da Teoria da Elasticidade dos Meios Contínuos, muito importantes para o entendimento das distintas etapas do trabalho. No desenvolvimento deste e dos demais capítulos, será considerado que o sólido cristalino é um corpo homogêneo. O material de que ele é formado será caracterizado como um contínuo de pontos matemáticos. Outros conceitos também importantes, serão introduzidos nos capítulos restantes a medida que forem sendo necessários.

1.4.1 Tensão.

A noção de tensão é um conceito fundamental na teoria da elasticidade. Quando uma força é aplicada à superfície de um corpo, esta força é transmitida através dele por meio de interações mútuas entre suas partes constituintes. A partir de um elemento de volume ΔV tomado no interior do sólido e da existência de um conjunto de forças uniformemente distribuídas sobre a superfície ΔS que envolve tal volume, é definido o vetor $\vec{T}$ (vetor tensão) que representa a força por unidade de área que esse elemento de volume exerce sobre o restante do material que o comprime ou o traciona. Por definição, o tensor de tensão $\vec{\sigma}$ é um campo tensorial que liga $\vec{T}$ a $\hat{n}$ (um vetor unitário normal à

superfície, apontando de dentro para fora de ΔV) em qual
 quer ponto da superfície ΔS e escrito como ⁽⁵⁾

$$\vec{T} = \vec{\sigma} \cdot \hat{n}$$

ou em termos dos índices

$$T_j = \sigma_{ij} n_i \quad ; i, j = 1, 2, 3 \quad (1)$$

O tensor de tensão σ_{ij} para $i = j$ (tensão normal) dá a componente da força ao longo do eixo positivo x_j que atua no elemento de área, cuja normal aponta na mesma direção. O tensor de tensão σ_{ij} para $i \neq j$ (tensão de cisalhamento) dá as duas componentes ortogonais da força que atua no mesmo elemento de área, nas direções positivas dos eixos x_j .

As equações de equilíbrio para a teoria da elasticidade, derivadas da lei de Newton do movimento e aplicadas a um elemento de volume arbitrário são escritas na forma ⁽⁵⁾

$$\vec{F} = \oint_{\Delta S} \vec{T} dS + \int_{\Delta V} \vec{f} dV$$

que em termos da definição (1) fica

$$F_j = \oint_{\Delta S} \sigma_{ij} n_i dS + \int_{\Delta V} f_j dV$$

mas, $n_i dS = dS_i$ é o elemento de área normal à direção x_i , logo

$$F_j = \oint_{\Delta S} \sigma_{ij} dS_i + \int_{\Delta V} f_j dV \quad ; i, j = 1, 2, 3$$

onde ΔS é a superfície fechada que envolve ΔV , F_j é a

força total que atua sobre o material contido em ΔV . O segundo termo do segundo membro é uma força qualquer generalizada, cujo efeito é proporcional ao volume sobre o qual ela atua. A igualdade acima pode ser escrita como⁽⁶⁻⁷⁾

$$F_j = \int_{\Delta V} \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + f_j \right) dV ; i, j = 1, 2, 3$$

Para condições de equilíbrio estático a lei de Newton exige que F_j seja nula e como a equação acima deve ser válida para qualquer ΔV , então

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + f_j = 0 ; i, j = 1, 2, 3 \quad (2)$$

O torque em relação a origem de um referencial arbitrado é dado por⁽⁵⁾

$$\vec{M} = \oint_{\Delta S} \vec{R} \times \vec{T} dS + \int_{\Delta V} \vec{R} \times \vec{F} dV$$

onde $\vec{R}$ é o vetor que localiza as forças em relação ao sistema escolhido. Substituindo a definição (1) na expressão para $\vec{M}$ anteriormente estabelecida, tem-se

$$M_j = \oint_{\Delta S} \epsilon_{jik} x_i \sigma_{pk} dS_p + \int_{\Delta V} \epsilon_{jik} x_i f_k dV$$

a qual pode ainda ser escrita como⁽⁶⁻⁷⁾

$$M_j = \int_{\Delta V} \left[\epsilon_{jik} x_i \left(\frac{\partial \sigma_{pk}}{\partial x_p} + f_k \right) + \epsilon_{jpk} \sigma_{pk} \right] dV ;$$

$$i, j, p, k = 1, 2, 3 \quad (3)$$

onde se empregou a relação

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_p} = \delta_{ip}$$

sendo δ_{ip} o delta de Kronecker, definido por

$$\begin{aligned}\delta_{ip} &= 1 \text{ se } i = p \\ &= 0 \text{ se } i \neq p\end{aligned}$$

O símbolo ϵ_{jik} que aparece nas equações (3) é um operador de permutação, que tem componentes

$$\begin{aligned}\epsilon_{jik} &= 1 \text{ se } jik \text{ é uma permutação par de } 123 \\ &= -1 \text{ se } jik \text{ é uma permutação ímpar de } 123 \\ &= 0 \text{ se dois índices quaisquer são iguais}\end{aligned}$$

O primeiro termo da equação (3) é nulo devido a consideração assumida de equilíbrio estático, a equação (2). Por outro lado, o torque total sobre o elemento de volume deve ser nulo qualquer que seja o ΔV considerado, logo

$$\epsilon_{jpk} \sigma_{pk} = 0 \quad ; \quad j, p, k = 1, 2, 3$$

e como o campo de tensões é arbitrário, esta igualdade é equivalente a

$$\sigma_{pk} = \sigma_{kp} \quad ; \quad p, k = 1, 2, 3$$

ou seja, o tensor de tensão é simétrico.

1.4.2 Deformação.

Em adição às tensões, a teoria da elasticidade está também voltada para as deformações ou seja, para as modificações na forma e nas dimensões do corpo, como resultado das forças que sobre ele atuam. A descrição da deformação baseada em conceitos puramente geométricos é feita através do vetor deslocamento $\vec{U}$, que é definido como um campo vetorial que transforma os pontos do interior do sólido de um estado inicial sem deformações ($\vec{X}$), para o estado final deformado ($\vec{X}'$)

$$\vec{X} \longrightarrow \vec{X}' = \vec{X} + \vec{U}$$

ou seja, após a deformação um ponto que antes tinha sua posição definida por $\vec{X}$ fica agora localizado em $\vec{X} + \vec{U}$, onde $\vec{U}$ é uma função de $\vec{X}$. O tensor de deformação e_{ij} é normalmente usado para dar a medida da deformação. Se no estado inicial ds_0^2 é o quadrado da distância entre dois pontos muito próximos, tomados no interior do sólido e ds^2 o seu valor após a deformação, e se $d\vec{x}$ é o vetor que liga esses pontos, o tensor de deformação é então definido⁽⁷⁾ como

$$ds^2 - ds_0^2 = 2 e_{ij} dx_i dx_j ; i, j = 1, 2, 3 \quad (4)$$

O vetor $d\vec{x}$ medido em relação ao sistema inicial deformado dá um valor bem diferente daquele que se obteria medindo-o no sistema deformado⁽⁵⁻⁷⁾.

Da geometria diferencial elementar tem-se

$$\begin{aligned}
 ds_o^2 &= dx_k dx_k \\
 &= \delta_{ij} dx_i dx_j ; \quad i, j = 1, 2, 3
 \end{aligned}
 \quad (5)$$

e

$$\begin{aligned}
 ds^2 &= \left(\delta_{ki} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \left(\delta_{kj} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j \\
 &= \left(\delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j ; \\
 &\quad i, j, k = 1, 2, 3
 \end{aligned}
 \quad (6)$$

Fazendo a diferença entre as relações (5) e (6) obtém-se

$$\begin{aligned}
 ds^2 - ds_o^2 &= \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j ; \\
 &\quad i, j, k = 1, 2, 3
 \end{aligned}$$

e comparando a expressão resultante para $ds^2 - ds_o^2$ com a definição (4) vem

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) ; \quad i, j, k = 1, 2, 3$$

Quando a variação espacial em u_j é infinitesimal o produto das derivadas pode ser desprezado em relação aos demais termos. Por definição⁽⁵⁻⁸⁾, isto corresponde ao caso de deformações lineares ou infinitesimais. Logo,

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) ; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (7)$$

Quando as deformações são infinitesimais a dependência anteriormente mencionada sobre a escolha do referencial se anula.

O tensor de deformação tem a seguinte interpretação geométrica⁽⁵⁻⁸⁾: e_{ij} para $i = j$ (deformação normal) dá a variação no comprimento de uma linha inicialmente paralela ao eixo x_j , por unidade de comprimento. e_{ij} para $i \neq j$ (deformação de cisalhamento) dá a semi-variação angular entre duas linhas mutuamente perpendiculares, inicialmente paralelas aos eixos x_i e x_j .

1.4.3 Forças sobre uma dislocação.

As forças que atuam sobre uma dislocação são forças generalizadas num sentido termodinâmico. São forças virtuais que representam a variação na energia do sistema pelo movimento da dislocação no campo das tensões internas. É conveniente classificar essas forças em dois tipos. O primeiro tipo compreende as forças originadas por campos de deformações elásticas, cujas fontes não inclui a dislocação propriamente dita. Este é o caso por exemplo de precipitados em uma estrutura cristalina, da presença de outras dislocações no cristal, da força aplicada externamente ao sólido.

A obtenção da força por unidade de comprimento da linha de dislocação que o campo de tensões internas gerado por uma fonte de deformação qualquer exerce sobre a dislocação, é feita a partir da consideração do trabalho virtual realizado pelas tensões internas para mover a dislocação. Para um anel de dislocação criado num meio onde existe uma fonte de deformação interna, o trabalho δW realizado pelo campo para produzir um deslocamento infinitesimal do anel é dado por^(6,9-12)

$$\delta W = - \vec{b} \cdot (\vec{\sigma} \cdot d\vec{A})$$

onde $\vec{b}$ é o vetor de Burgers da dislocação, $\vec{\sigma}$ é o tensor de tensão e $d\vec{A} = dA \hat{n}$ é o acréscimo elementar na área limitada pelo anel e $\hat{n}$ é um vetor unitário normal a essa superfície. O sentido positivo de $\hat{n}$ é determinado pela regra do parafuso da mão direita, com respeito à direção positiva de $\hat{t}$, o versor da tangente tomada em cada elemento de comprimento $d\ell$ da dislocação, indicando uma circuitação no sentido anti-horário. Se cada um dos elementos $d\ell$ da dislocação sofre um deslocamento virtual $\delta \vec{r}$, a área limitada pelo anel varia de

$$d\vec{A} = d\ell (\delta \vec{r} \times \hat{t})$$

e o trabalho total realizado é

$$\begin{aligned} \delta W &= - \oint_D \vec{b} \cdot [\vec{\sigma} \cdot (\delta \vec{r} \times \hat{t})] d\ell \\ &= - \oint_D (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \cdot (\delta \vec{r} \times \hat{t}) d\ell \\ &= - \oint_D [(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \hat{t} d\ell] \cdot \delta \vec{r} \end{aligned}$$

onde D é o comprimento do anel de dislocação.

Por outro lado, a força que atua em cada elemento $d\ell$ deve satisfazer a igualdade

$$\delta W = - \oint_D d\vec{F} \cdot \delta \vec{r}$$

logo, comparando as duas últimas igualdades tem-se

$$\oint_D \vec{dF} \cdot \vec{\delta r} = \oint_D [(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \hat{t} d\ell] \cdot \vec{\delta r}$$

e como $\vec{\delta r}$ é uma variável arbitrária ao longo do anel,

$$\vec{dF} = (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \hat{t} d\ell$$

e finalmente

$$\frac{\vec{dF}}{d\ell} = (\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \hat{t} \quad (8a)$$

que é a força por unidade de comprimento que atua sobre a dislocação, devida ao campo elástico gerado por fontes internas de deformação. Esta é a equação de Peach-Koehler⁽¹¹⁾.

Alternativamente, a equação anteriormente obtida pode ser escrita em termos de índices como

$$F_i = \epsilon_{ijk} t_k \sigma_{lj} b_l ; i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (8b)$$

sendo as equações (8), uma forma geral.

Nos cristais reais a dislocação pode se movimentar em forma conservativa em certos planos específicos. Estes planos são determinados pela própria linha de dislocação e pelo seu vetor de Burgers. Logo, é conveniente obter a componente da força contida no plano de deslizamento, a qual pela equação (8a) deve ser sempre perpendicular à linha de dislocação. Logo ela deve atuar na direção definida por $\hat{n} \times \hat{t}$, onde $\hat{n}$ é um vetor unitário perpendicular ao plano. Assim a componente (F_d) do deslizamento é

$$F_d = [(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) \times \hat{t}] \cdot (\hat{n} \times \hat{t})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} F_d &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \sigma_{pi} b_p t_j t_m n_l \\ &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \sigma_{pi} b_p t_j t_m n_l \\ &= (\delta_{il} \sigma_{pi} b_p n_l) (\delta_{jm} t_j t_m) \\ &= \sigma_{pl} b_p n_l \end{aligned}$$

ou numa forma mais simplificada

$$F^f = \sigma^f b \quad (9)$$

onde o índice f diz respeito apenas ao tipo da fonte de de formação interna. σb é a força por unidade de comprimento da linha de dislocação que atua no plano de deslizamento sem pre perpendicularmente à dislocação, ao longo de todo o seu comprimento.

O segundo tipo de forças inclui a auto-força da dislocação, a qual depende apenas das propriedades geomé tricas locais do seu proprio campo de deslocamentos ou seja, da sua configuração no interior do cristal⁽⁹⁻¹²⁾. Muito embo ra este caso possa ser tratado de modo semelhante ao anteri or, será empregado um outro procedimento, o qual visa ofere

cer maiores detalhes do fenômeno. Isto será estudado no capí
tulo seguinte, onde a força é designada tensão de linha, co
mo é normalmente feito na literatura.

Capítulo 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

(INFLUÊNCIA DE PRECIPITADOS NA TENSÃO DE FLUXO)

As experiências têm demonstrado que de um modo geral os materiais sólidos cristalinos podem ser deformados quando solicitados por forças aplicadas externamente . Tem sido verificado ainda que até um certo valor limite para a força aplicada, esses materiais recuperam suas dimensões originais quando a força aplicada é removida. Este fenômeno é chamado de comportamento elástico. No entanto quando a força aplicada excede aquele valor limite, os sólidos cristalinos sofrem uma deformação com características diferentes da anterior. Eles não mais recuperam suas dimensões originais pela retirada do agente deformador. Diz-se então que eles sofreram uma deformação plástica ou simplesmente , uma deformação permanente. O comportamento dos materiais nesse estado de deformação não é mais regido pela lei de Hooke. A descrição matemática da deformação plástica ainda não está muito bem desenvolvida como a deformação elástica, através da teoria da elasticidade. Isto é devido ao fato da fenomenologia do processo plástico ser muito mais complexa. Para o seu entendimento é preciso que se considere os detalhes da estrutura dos materiais, os quais são ignorados quando se estudam apenas as propriedades elásticas.

Certa evidência sobre a natureza dos procesos de deformação plástica tem sido fornecida pelas experiências, as quais empregam como principais métodos de estudo o exame das bandas de deslizamento, a análise da deformação em cristais e a medida da resistência ao escoamento. Os resultados obtidos por tais métodos têm comprovado que a tensão de fluxo, calculada em termos de forças coesivas entre átomos, a partir de um modelo teórico de rede perfeita é em muitas ordens de grandeza maior que a tensão de cisalhamento para o início do fluxo plástico, observada em cristais reais. Esta tensão é chamada de tensão crítica de cisalhamento ou CRSS. Fatos como estes é que serviram como base para a aceitação da existência das dislocações. Isto também motivou o estudo dos fatores responsáveis pela resistência ao cizalhamento, como uma introdução ao modo de se procurar interpretar as propriedades das dislocações. Como as deformações plásticas são consequências do movimento das dislocações no interior do sólido, a tensão crítica de cisalhamento nada mais seria do que a tensão requerida para colocar em movimento a dislocação através da rede cristalina. Sabe-se no entanto, que a tensão crítica de cisalhamento é mínima em direções específicas sobre certos planos cristalográficos. Normalmente o plano de deslizamento é o plano de maior densidade atômica e a direção do deslizamento é a direção do máximo empacotamento dentro desse plano, segundo o modelo de esferas rígidas densamente compactadas. Por outro lado, como os planos de maior densidade são também os planos mais espaçados da estrutura cristalina, a resistência ao deslizamento é em geral menor para eles do que para qualquer outro conjunto de planos⁽¹³⁾.

Contudo os mecanismos de deformação plástica não se resumem apenas ao simples relacionamento entre a estrutura atômica e os defeitos da rede cristalina, como normalmente ocorre em monocristais. As amostras policristalinas não se deformam na região plástica seguindo uma lei relativamente simples. No entanto, mesmo no caso de estruturas cristalinas simples, podem surgir contribuições extras que influenciam consideravelmente o processo de deformação plástica⁽¹⁴⁾, como ocorre em ligas onde a presença de átomos de soluto ou precipitados oferece uma resistência adicional ao cisalhamento.

No presente trabalho, são estudadas apenas as propriedades mecânicas que resultam da interação entre as dislocações móveis e partículas precipitadas no interior de uma estrutura cristalina. Tais partículas deformam localmente a rede cristalina criando campos de tensões elásticas de curto alcance, os quais atuam como obstáculos à movimentação da dislocação através do sólido⁽¹⁵⁾.

2.1 Endurecimento por precipitação.

Quando um sólido cristalino contém átomos de um outro elemento numa solução sólida saturada, os átomos de soluto têm a tendência de precipitar em certas regiões da matriz. O primeiro estágio do processo de precipitação, para a concentração de solutos constante, consiste na formação de pequenos segregados de átomos de soluto, os quais constituem regiões estáveis, com propriedades químicas diferentes da composição média da matriz. A continuidade do processo provoca o crescimento das partículas, formando regiões de ordenamento definido no interior da estrutura. A formação de estrutu

ras de transição é favorecida pela semelhança dos arranjos atômicos entre elas e a matriz. Isto resulta numa maior energia interfacial e a nucleação da segunda fase ocorre facilmente, estando o decrescimo máximo da energia livre, associado com a formação de uma fase de equilíbrio. Os precipitados assim obtidos, têm estruturas cristalinas diferente da matriz e são coerentes com ela. Como os sólidos cristalinos com precipitados são produzidos por reação de estado sólido de ligas que são monofásicas a temperaturas suficientemente elevadas, é natural que os átomos de soluto que formam o precipitado, sejam solúveis em algum grau na matriz. Devido a isso, mesmo nas temperaturas em que são estáveis, os precipitados apresentam uma tendência de reduzir sua área superficial total, por um processo de crescimento de grão, chamado de envelhecimento da liga. Os precipitados menores que uma certa dimensão crítica tendem a se redissolver e os precipitados maiores crescem.

A forma geométrica e as dimensões dos precipitados, assim como a natureza da interface entre eles e a matriz exercem grande influência sobre a tensão crítica de cisalhamento^(4,12-15). Como o volume médio dos precipitados é diferente do volume atômico do átomo da matriz, a rede cristalina em torno dessas partículas é obrigada a acomodar as variações de dimensões, o que é feito na forma de um campo de deformações, muito similar ao campo gerado por um átomo de soluto na matriz.

A figura 1 mostra um conjunto de átomos de soluto precipitados na forma de uma plaqueta com interfaces coerentes.

A interpretação do endurecimento de uma li

ga com átomos de soluto completamente precipitados, de um modo geral está baseada na teoria desenvolvida por Mott e Nabarro⁽¹⁶⁾, a qual considera que a resistência oferecida ao movimento de uma dislocação é originada da interação entre o campo de deformações elásticas dos precipitados e o da própria dislocação.

O campo das deformações internas devido a presença dos precipitados, embora sendo de curto alcance interfere no movimento como uma barreira de largura finita, a qual deve ser transposta pela dislocação. A figura 2 mostra uma situação típica, na qual a dislocação ao longo da direção do seu movimento encontra regiões no interior da matriz onde a tensão interna atua de modo a impedir sua livre movimentação através do sólido. Para a continuidade do movimento é preciso aplicar tensões externas suficientes para fazer com que tais obstáculos sejam vencidos⁽¹⁷⁾. No processo não está sendo levada em conta a ativação térmica.

Alem dos fatores anteriormente citados, é preciso que também se considere a largura dos obstáculos⁽¹⁸⁾. De um modo geral a largura de um obstáculo, introduzida como um parâmetro na descrição analítica do processo, é completamente determinada pela natureza da interação entre os precipitados e a dislocação. Para muitos precipitados ela pode ser representada elasticamente como um centro de dilatação, o qual interage com a dislocação através do seu campo de tensões. Logo, cada centro de dilatação define no interior da matriz uma região de influência no interior da qual os átomos de soluto precipitaram⁽¹²⁾.

Para o estudo do cisalhamento, a dislocação é considerada como um segmento flexível, ao qual é permiti

do independência de movimento sobre um plano arbitrado, sob a influência da tensão de linha. Desse modo, as seções vizinhas da linha de dislocação poderão se movimentar parcial e independentemente dos demais segmentos, com total liberdade para assumir sempre que possível uma configuração de mínima energia, encurvando-se ao redor das regiões de grande energia de interação, como indica a figura 3. No entanto, ela não é tomada como um segmento perfeitamente flexível, já que não é possível contornar obstáculos de pequenas dimensões e muito pouco espaçados, como ocorre nos casos onde as barreiras e vales do campo interno de tensões estão finamente dispersos. Isto faz com que a linha de dislocação mantenha uma configuração muito próxima da configuração reta original.

Para uma dada concentração de precipitados - três situações podem ocorrer:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{2} &\ll \rho_{\min} \\ &\cong \rho_{\min} \\ &\gg \rho_{\min} \end{aligned} \quad (10)$$

onde λ é o espaçamento médio entre os obstáculos.

No primeiro caso, a metade do espaçamento médio entre os precipitados é muito menor que o raio mínimo de curvatura. Este é o caso de obstáculos finamente dispersos no interior da matriz, como mostra a figura 3a. Muito embora a linha de dislocação seja fortemente desviada pelos campos localizados de tensões, isto não é suficiente para modificar de forma acentuada sua configuração original, de modo a provo

car encurvamentos pronunciados na região entre os obstáculos, mesmo a dislocação sendo flexível. Desse modo a linha de dislocação fica impedida de ocupar o fundo dos vales do campo interno de tensões pois como explicado anteriormente, a tensão de linha que passaria a atuar nos extremos do segmento encurvado, evitaria que a dislocação abandonasse por completo sua configuração original. Em razão disto a linha de dislocação se movimenta no interior da matriz como um segmento rígido, sob a ação de uma tensão aplicada. Com o aumento da distância entre os obstáculos, a dislocação ganha liberdade para ocupar posições cada vez mais próximas do fundo dos vales e com isso a linha de dislocação pode experimentar maiores encurvamentos na região entre os obstáculos, como é mostrado na figura 3b. Isto corresponde ao caso em que o raio mínimo de curvatura é ainda menor que a metade da distância entre os precipitados. Sob a ação de tensões aplicadas crescentes, os encurvamentos passam a aumentar independentemente uns dos outros, até a dislocação adquirir condições para vencer as barreiras que se opõem ao seu movimento. Esta é a razão pela qual a liga apresenta tensões de fluxo maiores que a do primeiro caso, pois agora a dislocação ocupa uma posição bem mais próxima da de menor energia que corresponde à configuração do fundo dos vales do campo de tensões. Quando o raio mínimo de curvatura é da ordem de grandeza da metade da distância entre os obstáculos, o mecanismo de Orowan⁽²⁰⁾ passa a controlar o movimento da dislocação através dos obstáculos, para uma dada tensão aplicada. Neste caso, a relação entre a tensão local e a tensão de linha é dada por

$$\frac{\tau}{b \sigma_l} = \frac{\lambda}{2} \quad (11)$$

onde τ é a tensão de linha, b o vetor de Burgers e σ_i é a tensão local. Esta relação indica que o comportamento de uma dislocação dentro do campo interno de tensões, depende do espaçamento médio entre os precipitados ou seja, da sua concentração na matriz. Desse modo a tensão de fluxo é também fortemente influenciada pela escala de dispersão dos precipitados⁽¹⁹⁾.

Aumentando ainda mais o espaçamento entre os obstáculos, haverá naturalmente uma maior facilidade para a ativação do mecanismo de Orowan, sob tensões aplicadas menores que a máxima. Isto corresponde ao terceiro caso, onde a metade do espaçamento médio entre os obstáculos é muito maior que o raio mínimo de curvatura. É neste caso que são registrados os maiores encurvamentos, como indica a figura 3c.

A figura 4 apresenta as várias etapas de funcionamento do mecanismo proposto por Orowan para explicar o comportamento de uma dislocação móvel através de um conjunto de obstáculos rígidos, largamente espaçados. Ela mostra uma dislocação reta que se movimenta em direção a dois obstáculos; (i) a força atuante sobre a dislocação faz com que ela se dobre na região entre os obstáculos e (ii) esse encurvamento aumenta a medida que a força aplicada é também aumentada. (iii) Eventualmente os segmentos vizinhos da dislocação encurvada se juntam e então ela logra vencer os obstáculos, deixando anéis de dislocação em volta deles.

2.2 Interação entre precipitados e dislocações.

De um modo geral existem forças mútuas entre dislocações e precipitados. Estas forças são devidas a diferentes causas. A mais simples é a interação entre os seus

campos de tensões elásticas. A resistência ao deslizamento é atribuída principalmente a esta interação.

Para a determinação da intensidade da força que atua sobre uma dislocação móvel no interior de um campo de tensões, devida ao desajuste atômico dos precipitados na matriz, é considerada como hipótese simplificadora que a precipitação consista simplesmente na penetração dos átomos de soluto e sua distribuição em regiões definidas no interior da matriz, sem que seus raios atômicos se alterem durante o processo da precipitação. Ainda para efeito de simplificação dos cálculos, os precipitados são considerados como inclusões esféricas, as quais deformam determinadas regiões da rede cristalina de um modo esfericamente simétrico.

O campo de tensões que envolve qualquer uma dessas partículas é muito similar ao campo gerado, quando uma esfera rígida de raio r é introduzida numa cavidade esférica de raio r_0 diferente de r , num meio elástico contínuo⁽⁹⁾. Neste caso, o parâmetro de desajuste atômico é dado por

$$\epsilon = (r - r_0)/r .$$

Naturalmente que, dentro deste contexto, qualquer uma dessas regiões da matriz, irá variar o seu raio de um fator múltiplo de $(1 + \epsilon)$ quando os átomos da matriz forem substituídos pelos átomos de soluto na formação do precipitado.

No restante deste trabalho, será assumido portanto, que o campo de tensões gerado pelos precipitados pode ser completamente descrito pelo modelo anteriormente des

crito.

A condição de equilíbrio que deve ser satisfeita pelo sistema formado do precipitado e da matriz, deve ser tal que as forças atuantes se compensem em cada elemento de volume⁽⁵⁻⁸⁾. As equações de equilíbrio, escritas a partir das equações (2), têm a forma

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} = 0 \quad ; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (12)$$

onde foi assumido $f_j = 0$.

σ_{ij} é o tensor de tensão definido por⁽⁵⁻⁸⁾

$$\sigma_{ij} = \lambda e_{\ell\ell} \delta_{ij} + 2G e_{ij} \quad ; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (13)$$

sendo e_{ij} o tensor de deformação, λ e G dois parâmetros constantes que independem do sistema de coordenadas espaciais⁽⁶⁾, $e_{\ell\ell} = e_{11} + e_{22} + e_{33}$.

No caso de deformações infinitesimais, a equação (7) mostra que

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad ; \quad i, j = 1, 2, 3$$

onde u_i são as componentes do deslocamento de um ponto de observação.

Fazendo uso das relações (7) e (13), a equação (12) pode ser escrita como

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} = G \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} \lambda \frac{\partial^2 u_\ell}{\partial x_i \partial x_\ell} = 0 \quad ; \quad i, j, \ell = 1, 2, 3$$

ou numa forma mais compacta,

$$\nabla^2 \vec{u} + \frac{\lambda}{2G} \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) = 0 \quad (14)$$

onde $\vec{u}$ como anteriormente definido é o vetor deslocamento do ponto em observação, tomado no interior da matriz.

A equação (14) pode ser reescrita numa forma mais cômoda, pelo emprego da relação vetorial

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{u}) = \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) - \nabla^2 \vec{u}$$

obtendo-se a seguinte expressão

$$\nabla (\nabla \cdot \vec{u}) - \frac{2G}{\lambda + 2G} \nabla \times (\nabla \times \vec{u}) = 0 \quad (15)$$

que é definida em qualquer sistema de coordenadas ortogonais.

Por outro lado, como o centro de dilatação é um precipitado de forma esférica, a solução da equação (15) fica grandemente simplificada, escolhendo um sistema de coordenadas esféricas centrado no próprio precipitado, como é indicado na figura 5. Com isso o campo dos deslocamentos $\vec{u}(\vec{r})$ passa a ser apenas uma função da distância do ponto de observação à origem do sistema, ou seja

$$\vec{u}(\vec{r}) = u(r) \hat{r}$$

onde $\hat{r}$ é o versor da direção radial.

Devido a simetria do problema, a equação (15)

fica

$$\nabla (\nabla \cdot \mathbf{U}) = \frac{d^2 U}{dR^2} + \frac{2}{R} \cdot \frac{dU}{dR} - \frac{2}{R^2} \cdot U = 0$$

cujas soluções são

$$U(R) = A R + B R^{-2}$$

onde A e B são as constantes de integração.

Impondo sobre a solução encontrada condições limites nas quais $U(R)$ seja nula para distâncias muito maiores que r (o raio do precipitado) e que na sua superfície os deslocamentos radiais sejam $|\epsilon| r$, obtém-se como solução final

$$U(R) = |\epsilon| \cdot \left(\frac{r}{R}\right)^3 R ; R \geq r \quad (16)$$

onde ϵ é o fator de desajuste atômico do precipitado com a matriz, uma grandeza adimensional que pode assumir valores positivos ou negativos.

A partir da substituição da igualdade (16) em (7) e posteriormente o resultado em (13), facilmente se obterá uma expressão para o campo de tensões elásticas gerado pelo precipitado e sua interação com uma dislocação colocada às suas proximidades. A figura 6 mostra essa situação ou seja, um precipitado localizado próximo a uma dislocação de cunha inicialmente reta. A origem do sistema de coordenadas é colocada sobre o precipitado e as coordenadas da dislocação, a qual pode se movimentar apenas sobre o plano parale

ao plano $Z = 0$, são $(-Y, -Z)$. O vetor de Burgers da dislocação aponta na direção negativa do eixo Y e a dislocação pode se movimentar paralelamente ao eixo X . Essa figura mostra que apenas a tensão σ_{yz} é capaz de exercer uma ação efetiva que se opõe ao movimento da dislocação sobre aquele plano, na direção Y escolhida. O valor da tensão, obtido como indicado anteriormente é

$$\sigma_{yz} = -6 G |\epsilon| r^3 \frac{Y Z}{R^5} ; R \geq r \quad (17a)$$

É evidente que no caso de uma dislocação de hélice com comprimento finito, em condições análogas à mostrada na figura 6, apenas a componente σ_{xz} do campo de tensões é que pode interferir no seu movimento sobre o plano de deslizamento. Neste caso,

$$\sigma_{xz} = -6 G |\epsilon| r^3 \frac{X Z}{R^5} ; R \geq r \quad (17b)$$

A força por unidade de comprimento que atua sobre a linha de dislocação, de acordo com a relação (9) do capítulo anterior, é

$$F^{int} = b \sigma$$

onde σ , dependendo das características da dislocação poderá ser dada por uma das duas equações (17), ou por uma combinação linear daquelas expressões.

Para o caso de uma dislocação reta com características iniciais de cunha ($\vec{b}$ apontando na direção Y)

no interior do conjunto de precipitados de coordenadas (X_n, Y_n, Z_n) como é indicado na figura 6, a equação anterior fica

$$F_c^{int} = - 6 G b |\epsilon| r^3 \sum_n \frac{(Y_n - Y)(Z_n - Z)}{|R_n - R|^5} ; R \geq r \quad (18a)$$

onde se fez o uso da relação (17a), ou

$$F_h^{int} = - 6 G b |\epsilon| r^3 \sum_n \frac{(X_n - X)(Z_n - Z)}{|R_n - R|^5} ; R \geq r \quad (18b)$$

para uma dislocação reta, com características iniciais de hélice ($\vec{b}$ apontando na direção X), onde foi usada agora a relação (17b).

2.3 Tensão de linha.

Uma dislocação reta, qualquer que seja o seu caráter, gera em torno de si um campo de deformações elásticas. A energia elástica por unidade de comprimento, armazenada num volume cilíndrico de raio Λ , tendo como eixo a própria dislocação, é dada por⁽¹⁰⁾

$$W = \frac{G}{4\pi} \left[(\vec{b} \cdot \hat{t})^2 + \frac{(\vec{b} \times \hat{t})^2}{1 - \nu} \right] \ln \frac{\Lambda}{d^*} \quad (19)$$

onde $\hat{t}$ é um vetor unitário tangente à linha de dislocação e d^* o raio do seu núcleo. A figura 7 indica que para uma dislocação reta, os deslocamentos dos pontos do interior do cilindro são iguais e independentes da coordenada X, o eixo do

cilindro, tal como acontece com os pontos p e q , os quais têm as mesmas coordenadas Y e Z . Isto se deve à própria simetria do campo dos deslocamentos. Quando a dislocação por um processo qualquer perde sua forma retilínea, passando a apresentar pequenas ondulações como as indicadas na figura, obviamente que os deslocamentos daqueles pontos são modificados, pois a simetria cilíndrica inicial é destruída. Alguns segmentos da linha de dislocação na sua nova configuração ficam mais próximos do ponto q enquanto que outros, ficam mais distantes do ponto p , e desse modo, um novo conjunto de coordenadas se faz necessário para exprimir os deslocamentos atuais desses pontos. Agora eles também dependem da coordenada X . Num meio elástico contínuo e isótropo as distorções da rede cristalina, para distâncias R muito maiores que Λ , são as mesmas que se mediria, se a linha de dislocação ainda fosse reta. No entanto, na região onde $R \leq \Lambda$, além do seu próprio campo existe um campo de deformações extras, de curto alcance, que se sobrepõe ao primeiro aditivamente. Este campo de deformações extras é gerado pela modificação da forma geométrica da dislocação. Nestas condições, a linha de dislocação adquire um estado de energia maior do que o da sua configuração originalmente reta. Em consequência dos encurvamentos a linha de dislocação torna-se menos estável, o que leva a dislocação a apresentar uma tendência de readquirir sua forma reta original, que é de menor energia. A esta tendência é que se associa a tensão de linha, definida por^(10,14-16)

$$\tau(\theta) = \lim_{\Delta L \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta W(\theta)}{\Delta L} \right) \quad (20)$$

onde $\Delta W(\theta)$ é a variação da auto-energia da linha de dis

locação devida a modificação de sua forma geométrica e ΔL é o aumento do seu comprimento. θ é o ângulo formado entre o vetor de Burgers da dislocação e sua configuração reta original, como está indicado na figura 8.

Para pequenos encurvamentos, a variação da auto-energia por unidade de comprimento da linha de dislocação, é dada por

$$\Delta w(\theta) = w(\theta + \delta\theta) - w(\theta) \quad (21)$$

onde $\delta\theta$ é a variação angular na orientação do vetor de Burgers. Para o caso de $\delta\theta$ pequeno, a energia de interação entre as partes vizinhas do segmento encurvado é muito pequena em relação a auto-energia da dislocação na sua forma inicialmente reta⁽²¹⁻²⁴⁾, razão pela qual ela não será incluída nos cálculos desenvolvidos em seguida.

Expandindo em série de Taylor o primeiro termo do segundo membro da igualdade (21), em torno do valor $\delta\theta = 0$, obtém-se

$$w(\theta + \delta\theta) = w(\theta) + \left. \frac{\partial w}{\partial \theta} \right|_{\delta\theta=0} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} \right|_{\delta\theta=0} (\delta\theta)^2 + \dots$$

Considerando agora que $\delta\theta$ tenha valor bem próximo de zero, a expansão anterior fica

$$w(\theta + \delta\theta) \cong w(\theta) + \left. \frac{\partial w}{\partial \theta} \right|_{\delta\theta=0} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} \right|_{\delta\theta=0} (\delta\theta)^2 \quad (22)$$

Por outro lado, de acordo com a consideração assumida e pela figura 8, tem-se

$$\begin{aligned} \delta\theta &\cong +\alpha && \text{para } \delta\ell^+ \\ &\cong -\alpha && \text{para } \delta\ell^- \end{aligned} \quad (23)$$

onde $\delta\ell^+$ e $\delta\ell^-$ são as variações no comprimento da disloca
ção, nas porções da direita e da esquerda do segmento encur
vado respectivamente. Ainda pela figura 8 obtem-se a seguin
te relação

$$\delta\ell = \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta Y}{\Delta X}\right)^2} \cdot \Delta X$$

onde

$$\frac{\Delta Y}{\Delta X} = \tan \alpha$$

e de acordo com (23), a igualdade anterior pode ser escrita
como

$$\delta\ell = \sqrt{1 + \alpha^2} \cdot \Delta X$$

ou

$$\delta\ell \cong \left(1 + \frac{1}{2} \alpha^2\right) \Delta X$$

de onde se conclue que $\delta\ell^+ = \delta\ell^- = \delta\ell$. Rearranjando os ter
mos da relação anteriormente obtida, tem-se

$$2(\delta\ell - \Delta X) = \alpha^2 \Delta X \quad (24)$$

onde o primeiro membro da igualdade representa a alongamento total ΔL da linha de dislocação.

A variação total da auto-energia entre as configurações final e inicial, de acordo com a equação (21) é

$$\Delta W = w^+ \delta \ell^+ + w^- \delta \ell^- - 2 \cdot \Delta x \cdot w(\theta)$$

Substituindo-se nesta igualdade as relações (22) e (23) obtém-se

$$\Delta W = \left(w(\theta) + \frac{d^2 w}{d\theta^2} \right) \cdot \alpha^2 \Delta x$$

que em termos da igualdade (24) fica

$$\Delta W = \left(w(\theta) + \frac{d^2 w}{d\theta^2} \right) \cdot \Delta L$$

e finalmente, a tensão de linha por unidade de comprimento da linha de dislocação, dependente da orientação do vetor de Burgers, de acordo com a definição (19) pode ser escrita na forma

$$\Gamma(\theta) = w(\theta) + \frac{d^2 w}{d\theta^2}$$

A força por unidade de comprimento da linha de dislocação é obtida a partir das equações (9) e (11) que dá

$$F^{T1} = b \sigma$$

$$= \tau(\theta) \cdot \frac{1}{\rho}$$

onde

$$\frac{d\theta}{d\ell} = \frac{1}{\rho}$$

sendo ρ o raio de curvatura e θ o ângulo de orientação do vetor de Burgers em relação ao elemento $d\ell$, tomado sobre a linha de dislocação.

Comparando-se as duas últimas igualdades obtem-se finalmente

$$F^{T1} = \tau(\theta) \cdot \frac{d\theta}{d\ell} \quad (25)$$

Capítulo 3

MÉTODO DE SIMULAÇÃO

No desenvolvimento do estudo simulado da tensão de fluxo para estruturas cristalinas com precipitados , procurou-se traduzir matematicamente de forma mais realista possível, toda a fenomenologia do processo da deformação plástica. O modelo construído é uma extensão de trabalhos recentemente desenvolvidos⁽¹⁻⁴⁾ para simular o movimento de uma dislocação no interior de sólidos cristalinos com precipitados. Para os casos em que a linha de dislocação conserva uma configuração essencialmente reta, foi visto no capítulo anterior, que dentre os fatores que influenciam mais acentuadamente o movimento, é a interação entre os campos de tensões elásticas dos precipitados e o da dislocação móvel, o fator que dificulta a livre movimentação da dislocação através do sólido, ao qual se associa a escala de dispersão da quelas partículas. Logo, o estudo é dirigido para a determinação da tensão de fluxo como uma função das dimensões dos precipitados.

3.1 Comentários sobre a distribuição aleatória dos precipitados.

O procedimento usado para a construção do mo

delo, diz respeito à realidade física da distribuição dos precipitados. Eles devem estar distribuídos aleatoriamente, pois seria esta a estrutura do equilíbrio de solidificação da liga. Muito embora, pelo resfriamento da solução, outras distribuições possam ser possíveis devido a diminuição do termo da entropia, em geral nessas temperaturas o coeficiente de difusão diminui bastante, fazendo com que prevaleça a distribuição aleatória. Por outro lado, conforme foi citado no capítulo anterior, os precipitados podem ser representados elasticamente como centros de dilatação, os quais definem em torno de si uma região de influência. Logo, uma descrição mais realista pode ser obtida, dividindo o espaço em células e introduzindo no interior da cada uma delas, um precipitado numa posição aleatória. Com isso a largura dos obstáculos passa a ser descrita analiticamente em termos das dimensões das células. Para facilitar os cálculos, as células foram consideradas com iguais dimensões D^3 e os precipitados, como inclusões esféricas de raios iguais. Todas as interfaces entre os precipitados e a matriz, são consideradas como completamente coerentes.

De acordo com as considerações anteriores, a concentração de precipitados na matriz é

$$c_p = \left(\frac{b}{D}\right)^3 \quad (26)$$

A concentração de átomos de soluto na matriz quando completamente precipitados é

$$c_s = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{D^3} \cdot \frac{n}{n + m}$$

onde n e m são respectivamente o número de átomos de so

luto e de solvente na composição da partícula, sendo r seu raio. Esta definição, escrita numa forma aproximada fica

$$C_s \cong \frac{4n}{n+m} \left(\frac{r}{D}\right)^3 = \beta \left(\frac{r}{D}\right)^3 \quad (27)$$

Para a simulação é considerada uma estrutura com 600 células, distribuídas em grupos de 10 células na direção X , 20 na direção Y e 3 na direção Z . A posição dos precipitados no interior de cada célula é definida por uma tripla de números gerados aleatoriamente, que representam as coordenadas (X,Y,Z) de um sistema de coordenadas retangulares, centrado na face frontal do conjunto, como mostra a figura 9

3.2 Comentários sobre a simulação da tensão de fluxo.

Estabelecida a distribuição aleatória para os precipitados, é iniciada a segunda etapa dos trabalhos na qual se faz a representação do comportamento de uma dislocação flexível no interior do arranjo espacial daqueles obstáculos, sob a ação de uma tensão aplicada. Foi mostrado no capítulo anterior que o campo interno das tensões elásticas gerado pelos precipitados exerce influência marcante sobre o movimento da dislocação e que muito embora a auto-energia da dislocação dependa da orientação do vetor de Burgers como está indicado na equação (19), quando se estuda a configuração de equilíbrio no campo das tensões internas, o que desempenha papel de grande importância é a tensão de linha. Esta não apenas depende da orientação desse vetor, como também leva em conta a sua variação devida aos encurvamentos da dislocação entre os obstáculos durante seu movimento, como indica a equação (25).

Se a dislocação deve ficar em equilíbrio es

tático em relação ao deslizamento, a condição que deve ser satisfeita pelas forças que atuam sobre a dislocação é

$$F^A + F^{Int} + F^{Tl} = 0 \quad (28)$$

onde F^A é a força aplicada externamente ao sólido, que de acordo com a relação (9) fica

$$F^A = \sigma^A b$$

F^{Int} e F^{Tl} são respectivamente, a força de interação da pela equação (18) e a força que se opõe aos encurvamentos da linha de dislocação, que é dada pela equação (25).

Em termos das relações anteriormente citadas a equação (28) passa a ser escrita como

$$\sigma^A b + 6 G b |\epsilon| r^3 \sum_n \frac{(Y_n - Y)(Z_n - Z)}{|R_n - R|^5} + \Gamma(\theta) \frac{d\theta}{d\ell} = 0 \quad (29)$$

para a dislocação com características iniciais de cunha e

$$\sigma^A b + 6 G b |\epsilon| r^3 \sum_n \frac{(X_n - X)(Z_n - Z)}{|R_n - R|^5} + \Gamma(\theta) \frac{d\theta}{d\ell} = 0 \quad (30)$$

para a dislocação com características iniciais de hélice .

Nas equações (29) e (30), θ é o ângulo entre o vetor de Burgers e o elemento $d\ell$ tomado ao longo da linha de dislocação, como mostra a figura 9.

Substituindo a definição (19) em (25), obtém-se para a tensão de linha a seguinte expressão

$$\tau(\theta) = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \left(1 + \nu - 3\nu \sin^2\theta \right) \ln \frac{\lambda}{d^*}$$

a qual para $\nu=1/3$, que é um valor fisicamente razoável, pode ser escrita numa forma aproximada como ⁽⁹⁾

$$\tau(\theta) \cong \frac{1}{2} k(\theta) G b^2 \quad (31)$$

onde

$$k(\theta) = \frac{4}{3} - \sin^2\theta$$

As equações (29) e (30) mostram que no modelo em desenvolvimento não está sendo levada em conta a interação entre as partes do segmento encurvado. Logo, $k(\theta)$ pode ser considerado como uma constante para pequenos encurvamentos, muito embora ele assuma valores diferentes para diferentes orientações originais da linha de dislocação.

As equações anteriormente citadas podem ser colocadas numa forma mais geral, a qual inclui também a largura dos obstáculos. Isto é feito através da normalização das distâncias nelas envolvidas, pelas dimensões das células de influência (D). O resultado que se obtém, após as simplificações convenientes é

$$\sigma^A + \frac{6 G |\epsilon| r^3}{D^3} \sum_n \frac{\xi_n \eta_n}{\rho_n^5} + \frac{\tau(\theta)}{b D} \frac{d\theta}{d\lambda} = 0 \quad (32)$$

Por outro lado, a relação (11), escrita na forma

$$\sigma_{MO} = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\theta)}{b D} \quad (33)$$

dá a tensão necessária para dobrar um segmento da linha de dislocação entre dois obstáculos distanciados de D , sem a ajuda dos campos internos. Ela corresponde à tensão necessária para ativar os mecanismos de Orowan (MO). Logo, para o modelo em desenvolvimento é preciso que $\sigma^A < \sigma_{MO}$, ou seja a dislocação não deve sofrer encurvamentos acentuados.

Substituindo a condição (33) na equação (32) obtem-se uma representação adimensional para a equação (28), a qual tem a forma seguinte

$$t + t_i \sum_n \frac{\eta_n \eta_n}{\rho_n^5} + \frac{1}{2} \frac{d\theta}{d\lambda} = 0 \quad (34)$$

onde os parâmetros t e t_i dados por

$$t = \frac{\sigma^A}{\sigma_{MO}} = \frac{1}{K(\theta)} \cdot \frac{\sigma^A}{G} \cdot \frac{D}{b} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} t_i &= \frac{6|\epsilon|}{K(\theta)} \cdot \left(\frac{r}{D}\right)^3 \cdot \frac{D}{b} \\ &= \frac{6|\epsilon|}{K(\theta)} \cdot c_s \cdot \frac{D}{b} \end{aligned} \quad (36)$$

quando convenientemente simulados, podem reproduzir o processo do envelhecimento da liga, variando o tamanho do precipitado para uma concentração de átomos de soluto constante, através do estudo da variação da relação t/t_i em função do parâmetro t_i , como será mostrado posteriormente.

3.3 Comentários sobre a simulação do movimento da dislocação.

Após o estabelecimento das bases para a obtenção da tensão de fluxo simulada, em função das dimensões dos precipitados, faz-se o estudo da simulação do movimento da dislocação. É considerada uma dislocação flexível, inicialmente reta e paralela ao eixo X, com liberdade para se movimentar ao longo da direção Y, tendo como plano de deslizamento o plano $Z = 0$, como está indicado na figura 9. A linha de dislocação é dividida em segmentos iguais de comprimento $D/20$, para se obter uma maior precisão nos cálculos de equilíbrio. Em seguida, é determinada a força atuante em cada uma das extremidades dos segmentos, devida exclusivamente ao campo de tensões dos precipitados e a linha de dislocação é deixada livre para se movimentar sobre o plano de deslizamento, até atingir uma configuração de equilíbrio sob a influência da tensão de linha. A partir de então, é adicionada a força aplicada e nova configuração estável é calculada. A força aplicada é então aumentada discretamente e novas configurações de equilíbrio são determinadas, até o sistema deixar de ser estável.

Por outro lado, o estudo do movimento através da equação (34) não considera o efeito da interface entre os precipitados e a matriz. Para o modelo, os precipitados são completamente coerentes. Logo, quando a dislocação atravessa as células em que o espaço foi dividido, podem ocorrer situações em que ela fique muito próxima de um dos centros de dilatação ou até mesmo coincida com alguns deles. Se isso ocorrer, de acordo com a equação (34), o segundo termo des

sa equação divergir. Para evitar situações como estas que não tem significado físico, impôs-se como restrição à distribuição aleatória dos precipitados, que

$$|\rho_n| \geq \frac{r}{D}$$

ou de acordo com a relação (27)

$$|\rho_n| \geq \sqrt[3]{C_s/\beta}$$

que para valores fisicamente razoáveis de C_s e β dá

$$|\rho_n| \geq 0.1$$

o que permite recolocar na posição $z_n = \pm 0.1 D$ os precipitados que durante a distribuição aleatória, caíam no interior da região $|z_n| < 0.1 D$, deixando porém imutável as coordenadas x_n e y_n , o que é um fato bem razoável. Por outro lado, como o campo de tensões dos precipitados é de curto alcance (proporcionais a ρ^{-3}), nos cálculos de equilíbrio são considerados apenas os precipitados que ficam contidos no interior de uma região esférica de raio $\rho=1.5$, tendo como centro cada um dos pontos definidos sobre a dislocação.

Como a equação (34) é válida apenas para os casos em que a linha de dislocação permanece essencialmente reta, foi feita a estimativa do intervalo de variação para o parâmetro t_i . Isto foi feito, considerando-se a situação mais desfavorável que é a de uma estrutura completamente ordenada, na qual a tensão média $\bar{\sigma}_i$ na matriz seja da mesma ordem de grandeza da tensão na porção média da distân

cia entre dois precipitados, como é indicado na figura 10⁵¹.
 O valor que se obtém para $\bar{\sigma}_i$, a partir da equação (33) é

$$\bar{\sigma}_i = 6 G |\epsilon| \left(\frac{r}{D} \right)^3 \sum_n \frac{f_n \eta_n}{\rho_n^5}$$

a qual para $\rho = 0.5$ e $f = \eta = \frac{1}{2} \rho \cos 45^\circ$, dá

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_i &= 48 G |\epsilon| \left(\frac{r}{D} \right)^3 \\ &= 48 \frac{G |\epsilon| c_s}{\beta} \end{aligned} \quad (37)$$

A intensidade máxima é atingida quando D torna-se igual a D_m . A partir desta condição o mecanismo de Orowan começa a atuar. Sob esta tensão o raio médio de curvatura torna-se igual a $D_m/2$ e fazendo a substituição desse valor na relação (9), obtém-se

$$\bar{\sigma}_i = \frac{\tau(\theta)}{b D_m / 2} = \frac{K(\theta) G b}{D_m} \quad (38)$$

Da comparação entre as igualdades (37) e (38) tem-se

$$\frac{D_m}{b} = \frac{K(\theta)}{48 |\epsilon| c_s}$$

a qual substituída em (36) dá

$$t_i = \frac{1}{8} \cdot \frac{D}{D_m}$$

donde se conclue que para $t_i < 0.1$, pelo menos em ordem de grandeza, a dislocação se movimentará mantendo uma configuração essencialmente reta, compatível portanto com a equação (34).

Capítulo 4

TÉCNICAS DE COMPUTAÇÃO

O desenvolvimento dos trabalhos de computação é feito em distintas etapas de processamento. A finalidade deste procedimento empregado é não apenas facilitar a elaboração de cada uma das partes, como também possibilitar a redução do tempo de computação.

As técnicas desenvolvidas para o tratamento de cada etapa, são descritas a seguir:

i - Na primeira etapa é feita a construção do arranjo espacial de células cúbicas, em número de 600, num conjunto de $10 \times 20 \times 3$ células, nas direções X, Y e Z respectivamente, como foi descrito no capítulo anterior. No interior de cada célula é gerado uma trípla de números aleatórios para representar as coordenadas do centro de dilatação, em relação ao sistema referencial mostrado na figura 9.

O programa de computação desenvolvido para a realização dos cálculos é chamado MATRIZ. Os resultados da execução são transformados num arquivo fonte, o qual é usado nos outros programas.

ii - A segunda etapa é voltada para a determinação das tensões que atuam sobre a dislocação reta ($d\theta/d\lambda = 0$) e que corresponde ao caso limite de $t_i \rightarrow 0$.

Empregando-se a equação (34), escrita na forma

$$M t + t_i \sum_{i=1}^M \sum_n \frac{\xi_n \eta_n}{\rho_n^5} = 0$$

onde M é o número total de pontos tomados sobre a linha de dislocação, obtem-se para a relação t/t_i a seguinte expressão

$$\frac{t}{t_i} = -\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \sum_n \frac{\xi_n \eta_n}{\rho_n^5} \quad (39)$$

Esta equação permite a determinação do valor máximo da relação t/t_i , para o qual a dislocação reta vence todos os obstáculos ao seu movimento. Ela também permite que se obtenha as coordenadas do ponto onde ocorre o máximo valor daquela relação.

Os cálculos referentes a esta etapa são desenvolvidos através do programa de computação RETA.

iii - Finalmente na terceira etapa, a dislocação é considerada flexível com tensão de linha dependente da orientação do vetor de Burgers. A simulação é iniciada a partir de uma configuração arbitrária para a linha de dislocação. Diferindo da etapa anterior, a dislocação tem agora liberdade para se movimentar por si só e não com passadas pré estabelecidas. A figura 11 dá uma idéia do procedimento empregado para simular o movimento da dislocação através do arranjo espacial de precipitados. Um ponto qualquer da linha de dislocação, como por exemplo o ponto 0, é movido de tal mo

do a satisfazer a equação (34) em relação à posição dos pontos vizinhos A e B, para um dado valor de t . O valor de t é então aumentado e o ponto O é deslocado em relação à perpendicular ao segmento AB que o divide ao meio, até equação (34) ficar novamente satisfeita. Conhecida a nova posição O', obtem-se a partir daí as seguintes relações geométricas

$$d = \frac{x_A - x_B}{2 \cos \alpha}$$

$$\alpha = \tan^{-1} \left(\frac{y_A - y_B}{x_A - x_B} \right)$$

$$s = s_A = s_B = d / \cos(\theta/2)$$

que permitem determinar as coordenadas de O', através de

$$\frac{1}{2} \frac{d\theta}{d\lambda} = \frac{\theta}{2s} = \frac{\cos(\theta/2)}{2d} = t + t_i \sum_n \frac{f_n \eta_n}{\rho_n^5} \quad (40)$$

obtendo-se como resultado

$$\begin{aligned} x_{O'} &= s \cdot \cos \left(\frac{\theta}{2} + \alpha \right) \\ y_{O'} &= s \cdot \sin \left(\frac{\theta}{2} + \alpha \right) \end{aligned} \quad (41)$$

A configuração de partida para a aplicação do método é obtida a partir de uma dislocação inicialmente reta, introduzida nas proximidades do ponto de máxima interação, obtido pelo método anterior. A dislocação é deixada

livre para procurar sua configuração de equilíbrio sob a influência da tensão de linha, para um pequeno valor do parâmetro t_1 . A partir de então, o valor de t é adicionado e em seguida faz-se a determinação da nova configuração de equilíbrio através das equações (40) e (41). O valor de t é aumentado discretamente e novas configurações estáveis são determinadas, até o sistema deixar de ser estável. Em seguida o valor de t_1 é aumentado e o processo é repetido, porém para cada valor particular desse parâmetro é tomada como configuração de partida, a última configuração estável. Para obter as sucessivas configurações que aproximam à configuração de equilíbrio, utilizou-se como procedimento adicional, fazer a variação das coordenadas X e Y de cada um dos pontos da linha de dislocação, começando por um dos seus extremos até o extremo oposto e em seguida voltando ao ponto de partida, obedecendo sempre as equações (40) e (41). Foram usadas como condições de contorno periódicas nos extremos da linha de dislocação, sua imagem especular como indica a figura 12. Tal procedimento é continuado até a completa estabilização do sistema. Os valores da tensão de fluxo simulada, para os distintos valores dos parâmetros t_1 são obtidos pela média entre o valor de t correspondente a última configuração de equilíbrio e a seguinte, quando essa condição não mais pode ser obtida. Os cálculos computacionais das configurações estáveis foram realizados através do programa FLEX.

O programa auxiliar que introduz a linha de dislocação reta na matriz, nas proximidades do ponto de interação máxima é chamado AUXIL. Este e os demais programas anteriormente citados, estão listados no apêndice.

Antes da utilização do último método descri

to na terceira etapa, outras tentativas foram feitas para traduzir o comportamento da dislocação no interior da matriz , sob a influência da tensão de linha. Na primeira delas, utilizou-se a equação (34) escrita na forma

$$t_m = t + t_i \sum_n \frac{f_n \eta_n}{\rho_n^5} + \frac{1}{2} \frac{d\theta}{d\lambda} \quad (42)$$

e os cálculos foram desenvolvidos a partir de um dos extremos da linha de dislocação. Escolhido o ponto, este é movido na direção Y sobre o plano Z = 0, em passadas uniformes de $\pm 0.1 D$, até se obter para t_m um valor bem próximo de zero, mantendo os demais pontos fixos . Em seguida, toma-se o segundo ponto movimentando-o de modo idêntico ao anterior até a equação (42) ficar satisfeita, com os pontos vizinhos fixos nas suas posições. Este procedimento é continuado até atingir o outro extremo da linha de dislocação, quando então o percurso é repetido em sentido contrário ao primeiro , assegurando-se com isso, a relaxação da tensão atuante. Aqui também são usadas condições de contorno periódicas nos extremos da linha de dislocação, ou seja a reflexão especular. A figura 13 dá uma idéia do procedimento descrito. No entanto, este método não se revelou favorável, pois além do tempo de computação ser excessivamente grande, a dislocação apresenta encurvamentos acentuados, fato que não é compatível com o comportamento esperado. Em razão disto, ele foi abandonado.

O segundo método desenvolvido, foi um aperfeiçoamento do caso anterior. Partindo de uma configuração arbitrária para a linha de dislocação, faz-se o movimento dos pontos representativos da linha de dislocação, como está indica

do na figura 14. O método consiste em movimentar um ponto como por exemplo o ponto O, de tal modo que se cumpra a condição do modelo anterior, com respeito à condição de mínimo valor (bem próximo de zero) do parâmetro t_m , dado pela equação (42), em relação a posição fixa dos pontos vizinhos designados por A(antes) e B(depois do movimento). A configuração relaxada é obtida através das relações geométricas

$$\Delta\theta = \delta_A + \delta_B$$

$$s_A + s_B = \Delta x \cdot \left(\frac{1}{\cos \delta_A} + \frac{1}{\cos \delta_B} \right)$$

$$\frac{Y_2}{\Delta x} = \frac{Y_B - Y_A}{\Delta x} = \tan \delta_A - \tan \delta_B \quad (43)$$

Assim podemos determinar δ_B de

$$\frac{\Delta\theta}{s_A + s_B} = t + t_i \sum_n \frac{\xi_n \eta_n}{\rho_n^5}$$

sendo δ_A dado pela equação (43).

Este modelo se mostrou satisfatório, no entanto o tempo de computação exigido para a completa relaxação é também muito grande. Isto é que levou ao método descrito na terceira etapa, onde foi obtida uma mais rápida convergência, mas mesmo assim o tempo de computação é ainda grande. Em decorrência disso e como a determinação do valor de t/t_i para o caso em que $t_i \rightarrow 0$ é apenas um cálculo relativamente simples, como indicado na equação (39), o qual não exige tem

pos de computação muito grandes, foi possível fazer cálculos estatísticos para este caso e não para a curva toda.

Capítulo 5

INTERPRETAÇÃO DOS RESULTADOS

Para o desenvolvimento dos cálculos da simulação do movimento da dislocação através do arranjo espacial de precipitados foi utilizado um computador digital modelo Dec. System 10.

Os precipitados são representados no processo por centros de dilatação e suas regiões de influência por células cúbicas de iguais dimensões (D^3). O posicionamento dos centros de dilatação dentro das células é feito através de uma trípla de números gerados aleatoriamente, procurando-se com isso traduzir da forma mais realística possível a estrutura do equilíbrio de solidificação de uma liga. Neste trabalho, é considerado uma estrutura de 600 células em grupos de 10 células na direção X, 20 na direção Y e 3 na Z, como é indicado no terceiro capítulo. Muito embora a distribuição seja aleatória, os centros de dilatação mais próximos do plano de deslizamento ficam distanciados deste de $\pm 0.1 D$.

Seguindo o roteiro descrito no quarto capítulo para as diversas etapas dos trabalhos, fez-se a determinação da máxima interação com uma dislocação reta. Com isso o tempo de computação pode ser grandemente reduzido, pois em vez de fazer o movimento da dislocação através de toda a extensão da matriz, fez-se apenas a determinação do valor de

t necessário para fazer a dislocação atravessar aquela região de máxima oposição ao seu movimento.

Para a determinação do limite inferior da tensão de fluxo simulada, o qual corresponde ao caso limite quando $t_i \rightarrow 0$, foram estudadas doze estruturas espaciais distintas, apenas para o caso de uma dislocação de cunha. O resultado obtido para a relação t/t_i foi 8.8 ± 0.6 . Para a dislocação de hélice, foi estudada somente uma estrutura, em razão de se ter obtido para a tensão de fluxo normalizada, um valor muito menor que o do caso anterior ($t/t_i = 0.3$). Conforme será mostrado mais adiante, esse valor não ajusta os dados experimentais.

Na determinação das tensões de fluxo normalizadas para os distintos valores de t_i foi verificado que as variações nas posições das sucessivas configurações da linha de dislocação, após cada ciclo de cálculos, diminuía a medida que ela tendia para a configuração estável. No entanto, em muitos casos essas variações de início diminuíam porém logo em seguida passavam a aumentar continuamente, até a dislocação atravessar completamente a região de máxima oposição ao seu movimento. No caso em que a estabilização tornava-se cada vez mais evidente, foi constatado um comportamento assintótico que indicava a necessidade de se tomar um tempo infinito de computação, para que a condição de completa estabilidade fosse atingida. O problema foi minimizado, com a consideração de que a completa relaxação das forças atuantes sobre a dislocação era atingida, quando a soma dos t_i dada pela equação (42) acusasse um valor menor que 1% do valor correspondente ao primeiro ciclo dos cálculos. A simulação é iniciada a partir de uma configuração originalmente reta e

de um valor bem pequeno para o parâmetro t_i , escolhido como 10^{-4} e fazendo-se $t = 0$ deixa-se a linha de dislocação relaxar sob a influência da tensão de linha até ser atingida a configuração de equilíbrio, o que foi obtida depois de 700 ciclos. Em seguida o parâmetro t é aumentado discretamente mantendo-se porém constante o valor de t_i , permitindo-se contudo que ocorra a relaxação para cada valor particular de t . Isto é feito até não ser mais possível obter uma configuração estável para a linha de dislocação. O valor de t correspondente à condição limite de estabilidade é obtido fazendo-se a média entre os valores da última configuração estável e aquela onde isto não mais se verificou. Em seguida toma-se para t_i um outro valor maior que o anterior e considera-se como configuração de partida a última configuração estável (a de maior t). O procedimento anterior é então repetido, o mesmo sendo feito para os distintos valores crescentes de t_i , até às proximidades do máximo valor a ele permitido, que foi estimado em $t_i < 0.1$, como indicado no capítulo 3.

A tabela I abaixo, mostra os valores simulados da relação t/t_i , para dislocações com características iniciais de cunha e de hélice, para uma única configuração de precipitados.

		$t_i \times 10^4$						
$\frac{t}{t_i}$		$\rightarrow 0$	1	5	10	50	100	500
	Cunha	10.5	15.5	18.8	19.8	20.5	20.8	21.0
	Hélice	0.30	0.50	0.70	0.80	0.90	0.95	0.96

Por outro lado, as equações (35) e (36) escritas na forma

$$\frac{t}{t_i} = \frac{\beta}{6 |\epsilon| c_s} \cdot \frac{\sigma}{G} \quad (44)$$

$$t_i = \frac{6 |\epsilon|}{k(\theta)} \cdot \sqrt[3]{\frac{c_s^2}{\beta^2}} \cdot \frac{r}{b}$$

com a ajuda da definição (27), mostram que para uma dada concentração de solutos c_s constante, o aumento de t_i corresponde ao crescimento das dimensões dos precipitados, o que naturalmente implica no aumento da distância entre essas partículas, devido a continuidade do processo de precipitação, como está implícito na equação (36). Daí a grande vantagem de se ter incluído na descrição analítica do processo da deformação plástica, a largura dos obstáculos ou seja, a dimensão D da célula de influência. Isto não apenas permite a simulação única para um grande intervalo de dimensões dos precipitados, como também torna independente das características físicas e químicas dos materiais que constituem a liga, os parâmetros t e t_i da simulação, como indica a equação (34). Em consequência disso, obtem-se o que se constitui numa parte importante deste trabalho que é a normalização das tensões de fluxo para precipitados com distintas dimensões, a uma única curva padrão. Esta curva, como se mostra na figura 15 pode ser confrontada com dados experimentais, respeitando naturalmente a ocorrência de erros experimentais. Essa figura mostra a variação da relação t/t_i com respeito ao parâmetro t_i para a dislocação de cunha. O limite inferior corresponde ao va

lor assintótico dessa relação quando $t_i \rightarrow 0$. O valor máximo de acordo com a estimativa feita no terceiro capítulo, deve ficar em torno de 0.1. Para valores de t_i maiores que 0.1 é esperado que o movimento passe a ser controlado pelo mecanismo de Orowan, como está indicado na figura 4, o que certamente diminuiria o valor da relação t/t_i . Quanto aos valores compreendidos entre os dois limites, isto está perfeitamente razoável pois para uma concentração de solutos constante, quando t_i é pequeno os precipitados são de pequenas dimensões e ficam muito pouco espaçados na matriz. Com isso, a dislocação fica impedida de ocupar o fundo dos vales do campo das tensões internas gerado por essas partículas, finalmente dispersas. Isto iria requerer tensões aplicadas fortíssimas para compensar a ação da tensão de linha originada pelos encurvamentos acentuados, o que não pode ser obtido. Consequentemente, a dislocação se movimenta como um todo através da matriz, mantendo uma configuração essencialmente reta, a partir de um certo valor do parâmetro t . Com o aumento de t_i cresce também o espaçamento entre os precipitados e a linha de dislocação ganha liberdade para assumir configurações bem mais parecidas com a do fundo dos vales, o que justifica o aumento verificado na tensão de fluxo, pois ela vai se distanciando cada vez mais do topo das barreiras que se opõem ao seu movimento.

Na figura 16 estão representadas as configurações da linha de dislocação, para distintos valores de t_i , correspondentes a última configuração estável e para o caso de uma dislocação de cunha. Quando t_i é pequeno, a dislocação permanece essencialmente reta. A medida que t_i aumenta ela começa a sofrer encurvamentos suaves em torno da região

de maior tensão de interação, a qual está situada em torno da posição $X/D = 9.0$.

Nas figuras 17-21, é feita a comparação entre os valores simulados e dados experimentais, para diversas ligas, com distintas concentrações de soluto, obtidos em literaturas recentes⁽²⁹⁻³¹⁾. Foi encontrado bom acordo.

Estes mesmos estudos, para a dislocação de hélice são mostrados nas figuras 22 e 23. Na figura 23 o ponto em torno do qual a linha começa a se encurvar é dado por $X/D = 8.0$.

A comparação entre valores simulados e dados experimentais mostrou que a contribuição da dislocação de hélice para o fluxo plástico é desprezível em comparação ao da dislocação de cunha.

Capítulo 6

DISCUSSÃO

No desenvolvimento do modelo idealizado para o estudo do movimento de uma dislocação através de um arranjo espacial de precipitados, algumas hipóteses simplificadas foram assumidas, muitas delas visando a redução do tempo de computação. Outras foram consideradas devido a grande dificuldade em se descrever matematicamente o comportamento de determinados fatores, como é o caso da variação das características da interface entre a matriz e os precipitados, pelo crescimento destes durante a precipitação. As limitações impostas ao modelo e que são inerentes ao processo de deformação plástica, certamente trariam modificações no valor da tensão de fluxo simulada. No entanto como tais contribuições são aditivas às consideradas, não há perdas de generalidades no problema estudado. As limitações dizem respeito em primeiro lugar aos cálculos de equilíbrio desenvolvidos com o uso da equação (34), os quais são válidos apenas quando a linha de dislocação durante o seu movimento conserva uma configuração essencialmente reta. Isto ocorre nos casos em que o parâmetro t_i é menor que 0.1, quando o raio de curvatura do segmento de dislocação é maior que a distância média entre os precipitados. Nestas condições, durante o movimento da dislocação o parâmetro $K(\theta)$ que aparece nas igualdades (44) não

experimenta grandes modificações, o que torna possível usar os valores de $1/3$ para a dislocação com característica inicial de cunha e $4/3$ para a de hélice. Por outro lado, para encurvamentos maiores que o máximo permitido para o modelo, quando então a dislocação lograria vencer os obstáculos pelos mecanismos de Orowan, como é ilustrado na figura 4, os resultados que poderíamos obter da simulação, certamente apresentariam uma aproximação muito pobre se comparados com dados experimentais. Isto prende-se ao fato de que nestes casos, para a tensão de linha dependente da orientação do vetor de Burgers, o parâmetro t_i não poderia mais ser tomado como uma propriedade local. Ele passaria a depender mais acentuadamente da configuração assumida pela linha de dislocação durante as diversas etapas do movimento simulado. Para uma descrição mais realista, se deveria incluir em adição à descrição analítica do processo, a interação entre os vários segmentos das partes encurvadas da dislocação, o que muito embora fácil de ser tratado matematicamente⁽¹³⁾, iria proporcionar um aumento considerável no tempo de computação.

A segunda limitação imposta, está relacionada com o fato de não ter sido possível incluir nos cálculos a influência das interfaces entre os precipitados e a matriz, quando eles são atravessados pela dislocação. Desse modo para a simulação, os precipitados são considerados como partículas completamente coerentes com a matriz, por todo o intervalo de variação permitido para t_i . Além disso, os precipitados são considerados todos com mesmas dimensões e forma esfericamente simétrica.

Finalmente como última limitação imposta ao modelo, foi considerado que o campo de tensões elásticas gerados pelos precipitados tem sua origem no desajuste atômico

co deles com a matriz. A razão de não se ter levado em conta a diferença entre os seus módulos de elasticidade é que tal contribuição influencia muito pouco na resistência ao deslizamento, como foi demonstrado no recente trabalho de Kuo e Arsenault⁽³⁾.

Dentro do contexto das limitações impostas ao modelo desenvolvido, as quais de um modo geral não são mais restritivas que as considerações feitas por outros pesquisadores^(1-4,24-28), era de esperar que os dados experimentais⁽²⁹⁻³¹⁾ quando normalizados em termos dos parâmetros da simulação (t/t_i e t_i), ficassem de certo modo ajustados à curva padrão dos resultados simulados. Isto é mostrado nas figuras 17-20, para ligas de Cu-Co, Al-Zn e $\text{Cu}_3\text{Au-Co}$. A figura 21 mostra a ajustagem de todos aqueles dados experimentais à curva padrão, para o caso de uma dislocação com características iniciais de cunha. Dentro de certa margem de erros experimentais, o acordo encontrado é bom. Por outro lado, os dados experimentais disponíveis são bastante limitados. A maioria dos estudos até então realizados apresentam apenas a variação de σ/G como uma função do tempo de envelhecimento da liga e não do tamanho do precipitado. Além do mais, os dados pertencem a um intervalo de variação muito pequeno comparado com o dos valores simulados. Isto prende-se ao fato de ser difícil a medição do tamanho dos precipitados, abaixo de uma certa faixa de valores, normalmente compreendida entre $10\text{\AA}$ e $40\text{\AA}$. Um outro fator que dificulta bastante a obtenção de dados correspondentes a pequenos valores do parâmetro t_i é que isto está relacionado a baixa concentração de solutos. Neste caso, para haver a precipitação, a solubilidade da liga deve ser muito próxima de zero.

Os resultados simulados mostram que para o ca

so de uma dislocação com características iniciais de hélice os resultados obtidos não ajustam os dados experimentais, como indicam os valores constantes da tabela I.

Este trabalho pode ser considerado como representativo do comportamento de uma dislocação no interior de um sólido cristalino com precipitados. Muito embora o modelo apresente uma série de limitações, isto não impede que ele seja tomado como uma extensão mais realista dentre as pesquisas realizadas até agora^(1-4,29-31).

Capítulo 7

CONCLUSÕES

1. Foi simulado o movimento de uma dislocação flexível com características iniciais de cunha e de hélice a través de um arranjo espacial de precipitados.
2. Foi verificado que a tensão de fluxo simulada a par tir de uma dislocação de hélice é muito pequena com parada com dados experimentais.
3. Para o caso de uma dislocação de cunha, na represen tação dos valores da tensão de fluxo para dados ex perimentais disponíveis de endurecimento por preci pitação, foi encontrado que a normalização dos valores em função dos parâmetros t/t_i e t_i , faz com que eles coincidam com a curva padrão dos valores simu lados.
4. Dentro de uma certa margem de êrros ex perimentais foi encontrado bom acordo entre resultados simula dos e dados experimentais.

R E F E R Ê N C I A S

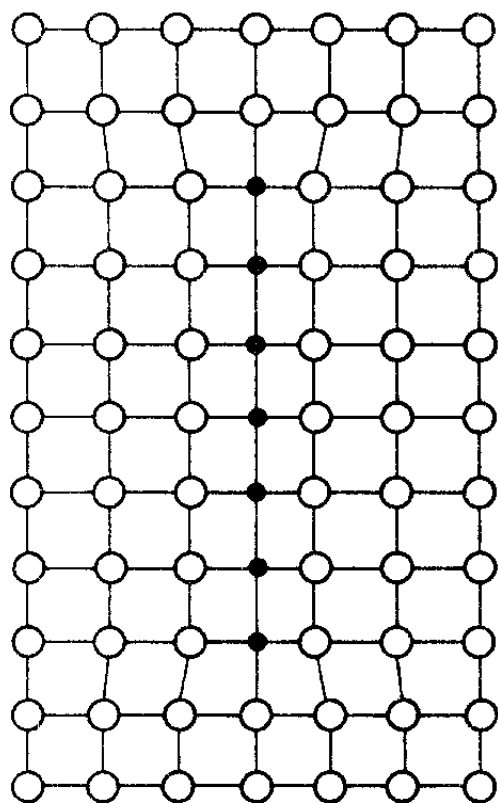
B I B L I O G R Á F I C A S

- (1) Ono,K., Intern. Conf. Strength Metals Alloys, Vol.I, Cambridge (1976).
- (2) Labusch,R. and Schwarz,R.B., Computer Simulation for Materials Application, Vol.II, NBS (1976).
- (3) Kuo,C.T.K. and Arsenault,R.J., Mater. Sci. Eng., 27 , 11 (1976).
- (4) Labusch,R., Acta Met., 20 , 917 (1972).
- (5) Fung,Y.C., Foundations of Solid Mechanics, Prentice-Hill Inc. NY (1965).
- (6) Landau,L. et Lifchitz,E., Théorie de L'Élasticité , Éditions Mir, Moscou (1967).
- (7) Sokolnikoff,I.S., Tensor Analysis, John Wiley and Sons Inc. NY (1965).
- (8) Schoeck,G., Notas dos seminários ministrados na Unicamp em 1978.
- (9) Weertman,J. and Weertman,J.R., Théorie Élémentaire des Dislocations, Manson et Cie. Éditeur (1970).
- (10) Hirth,J.P. and Loth,J., Theory of Dislocations, McGraw Hill, NY (1968).

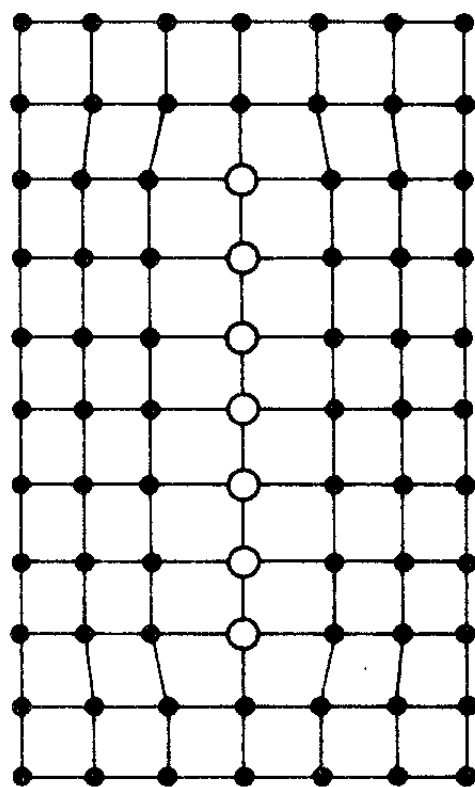
- (11) Peach, M. and Koehler, J.S., Phys. Rev. 80 , 436 (1950).
- (12) Bacon, J.D., Barnett, D.M. and Scattergood, R.O., Prog. in Mater. Sci., 23 (1978).
- (13) Dieter, G.E., Mechanical Metallurgy, McGraw-Hill Co. , NY (1964).
- (14) Friedel, J., Dislocations, Addison-Wesley Co., London (1964).
- (15) Kelly, A. and Nicholson, R.B., Prog. in Mater. Sci., 10 (1963).
- (16) Mott, N.F. and Nabarro, F.R.N., Strength of Solid, Phys. Soc., London (1948).
- (17) Cottrell, A.H., Dislocation and Plastic Flow in Crystals Oxford Univ. Press (1953).
- (18) Labusch, R., Phys. Status Solidi, 41 , 659 (1972).
- (19) Guinier, A., J. Phys. Radium, 3 , 124 (1942).
- (20) Orowan, E., Discussion - Symposium on Internal Stress , Inst. Metals, London (1952).
- (21) Eshelby, J.D., Solid State Phys., 3 , 79 (1956).
- (22) Nabarro, F.R., Basinski, Z.S. and Holt, D.B., Ad. Phys., 13 193 (1964).
- (23) Nabarro, F.R., Theory of Crystal Dislocation, Oxford (1961).
- (24) Brown, L.M., Phil. Mag., 10 , 441 (1964).

- (25) Fleischer, R.L., Acta Met., 9 , 966 (1961).
- (26) Idem 10 , 835 (1962).
- (27) Boser, O., J. Appl. Phys., 44 , 1033 (1973).
- (28) Idem 44 , 1038 (1973).
- (29) Witt, M. and Gerold, V., Scripta Met., 3 , 371 (1969).
- (30) Ibrahim, I.A. and Ardell, A.J., Acta Met., 25 , 1231 ,
(1977).
- (31) Amin, K.E., Gerold, V. and Kralik, G., J. Mater. Sci., 10
1519 (1975).

F I G U R A S



(a)



(b)

Fig. 1 - Representação esquemática de precipitados que surgem em deformações coerentes.

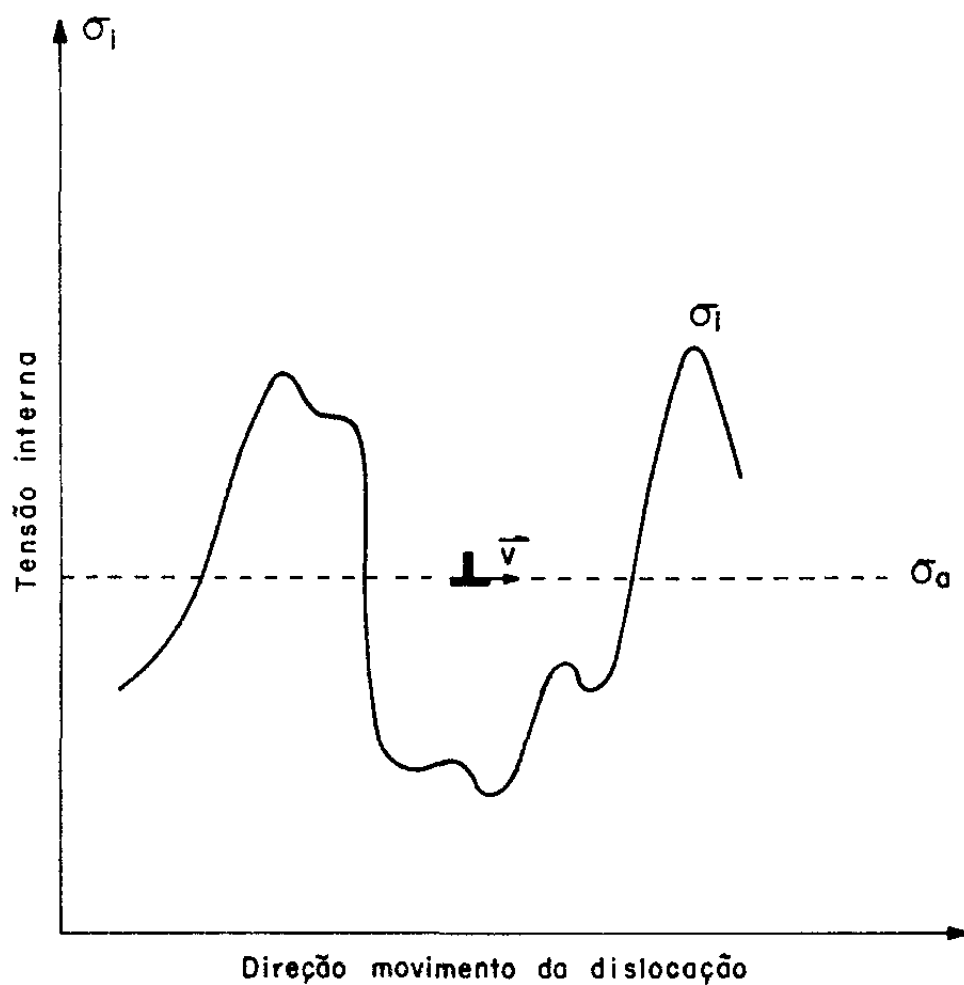
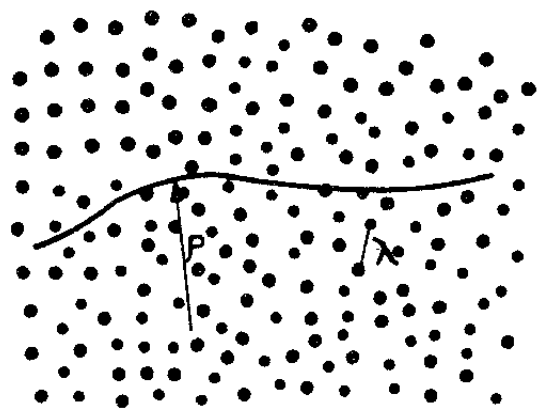
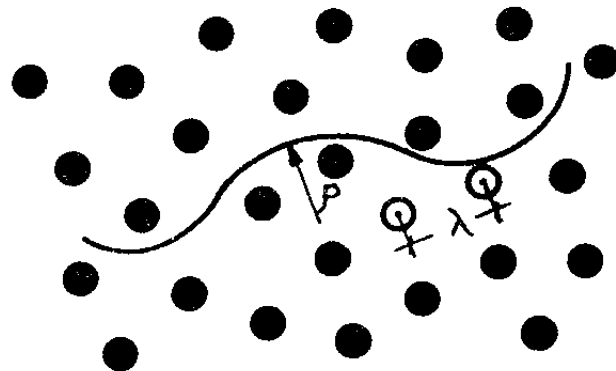


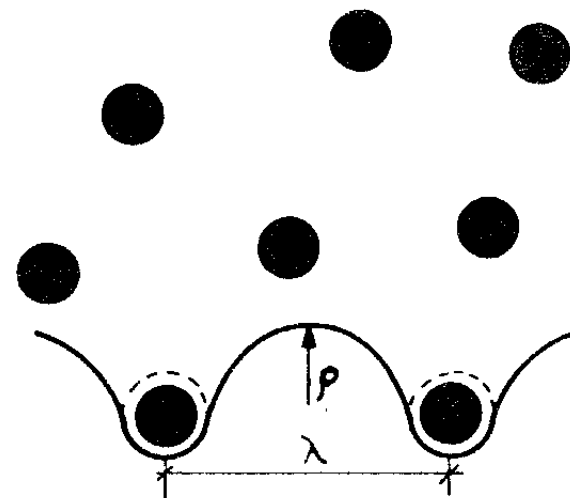
Fig. 2 - Campo interno a ser vencido pela dislocação móvel, sob a ação de uma tensão aplicada.



(a)



(b)



(c)

Fig. 3 - Movimento de uma dislocação através de um arranjo espacial de obstáculos - aspecto da configuração geométrica da linha de dislocação.

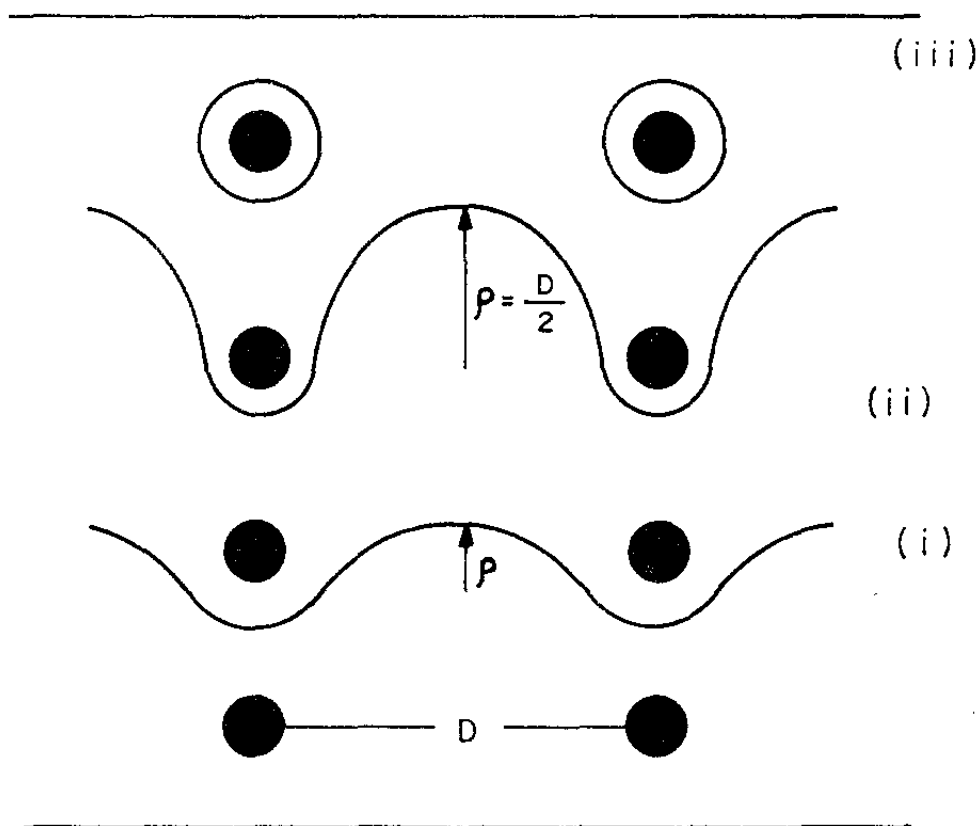


Fig. 4 - Mecanismo proposto por Orowan para explicar a passagem da dislocação através de obstáculos rígidos largamente espaçados.

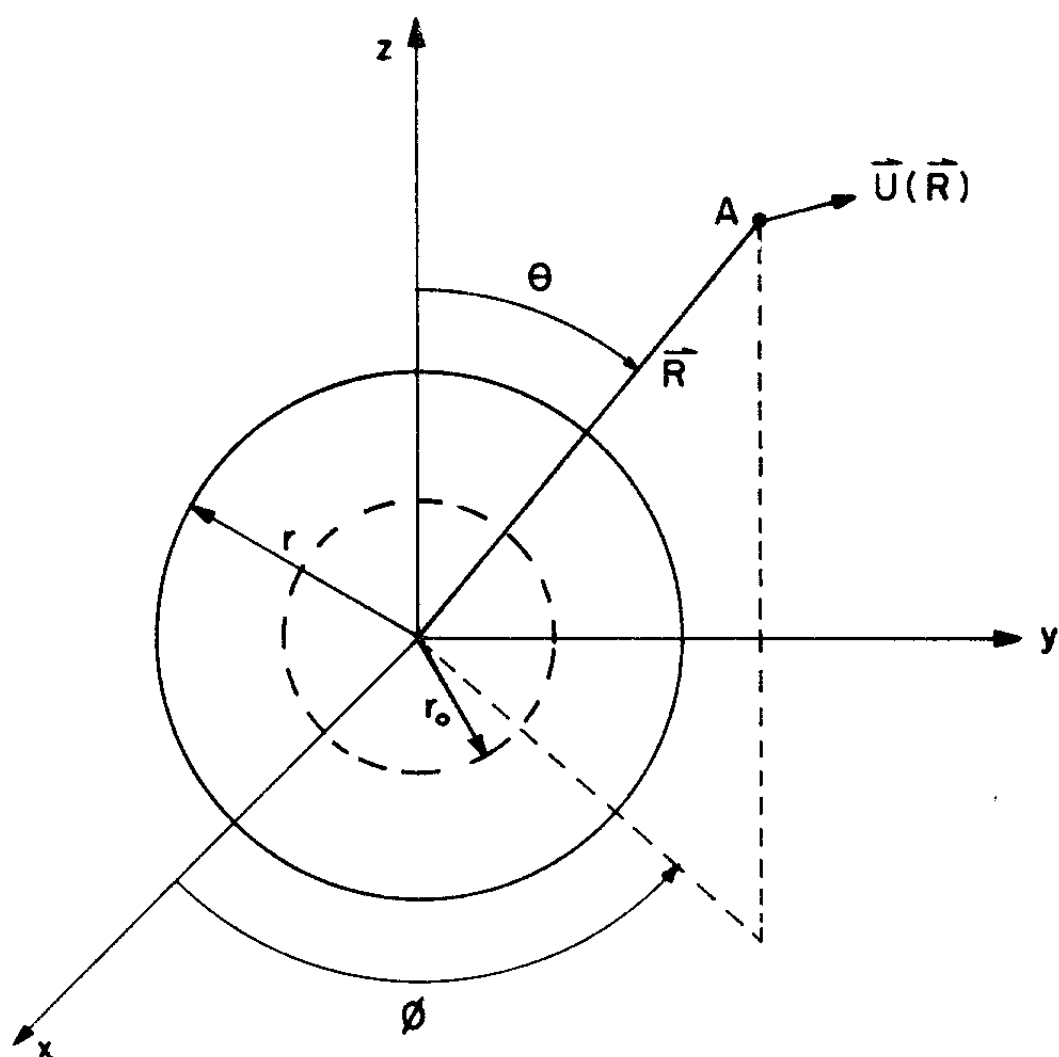


Fig. 5 - Campo dos deslocamentos devido a introdução de um obstáculo com simetria esférica na matriz.

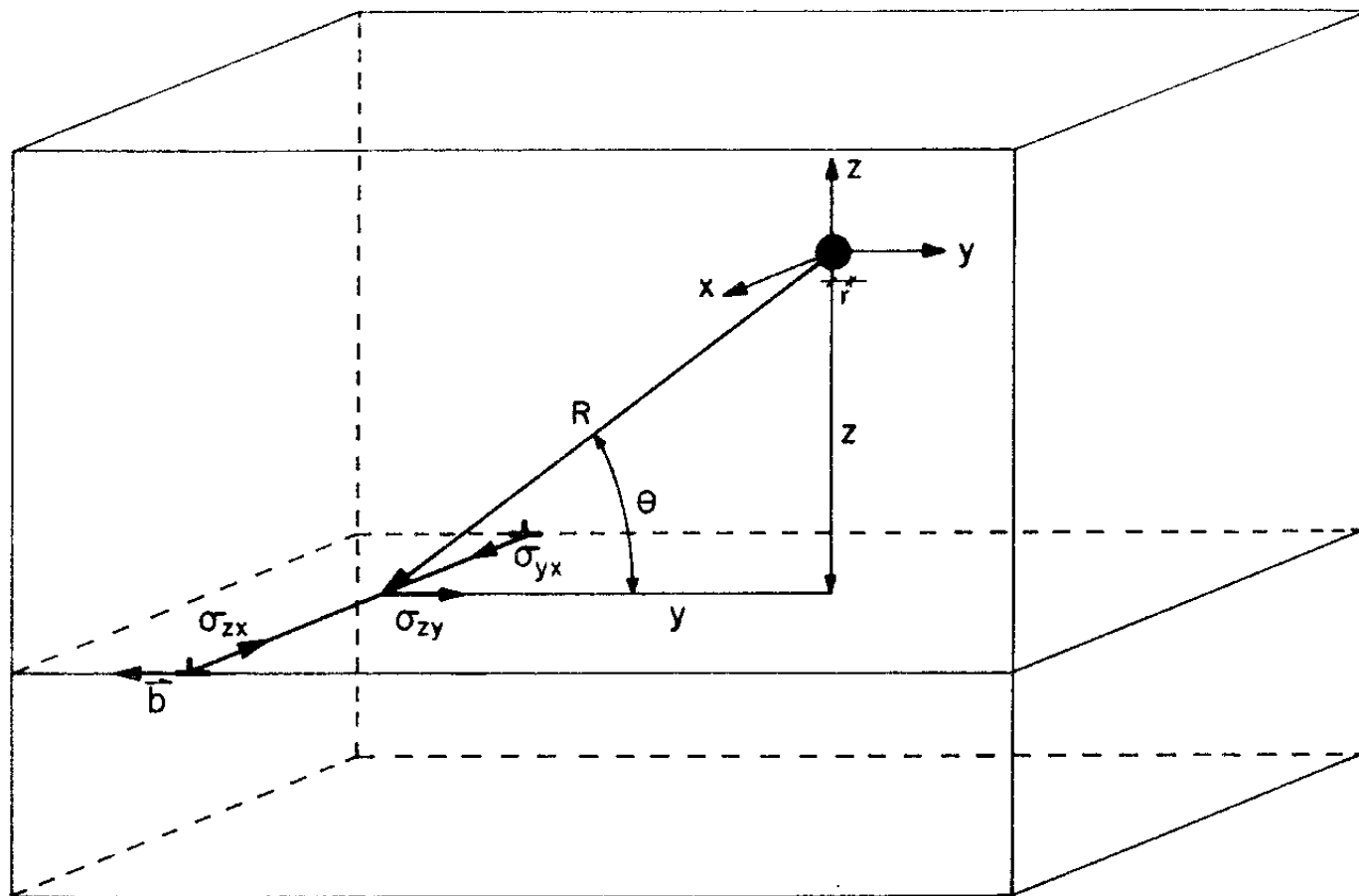


Fig. 6 - Ação do campo elástico gerado por um precipitado sobre uma dislocação localizada na sua vizinhança.

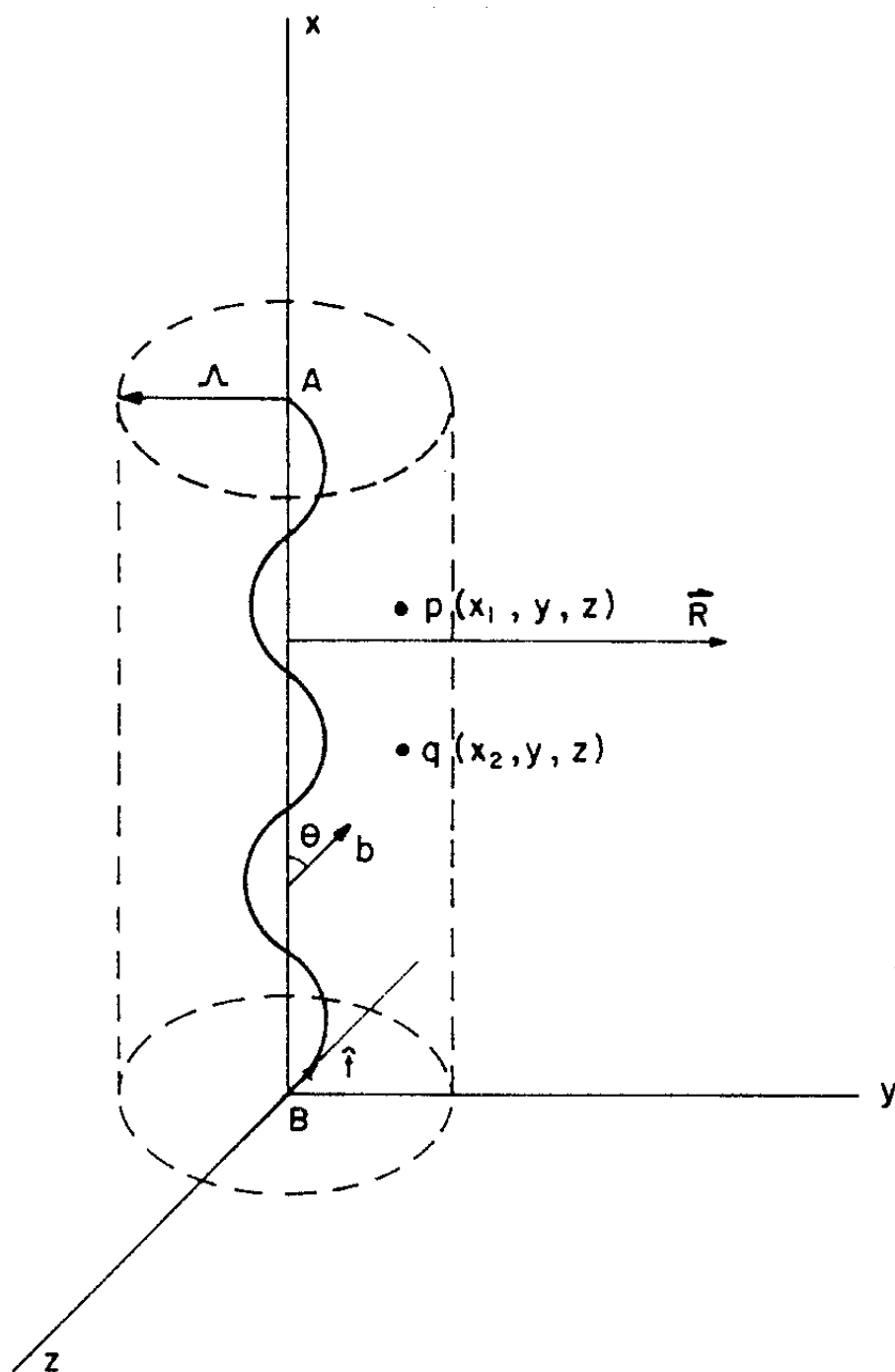


Fig. 7 - Tensão de linha de uma dislocação en curvada.

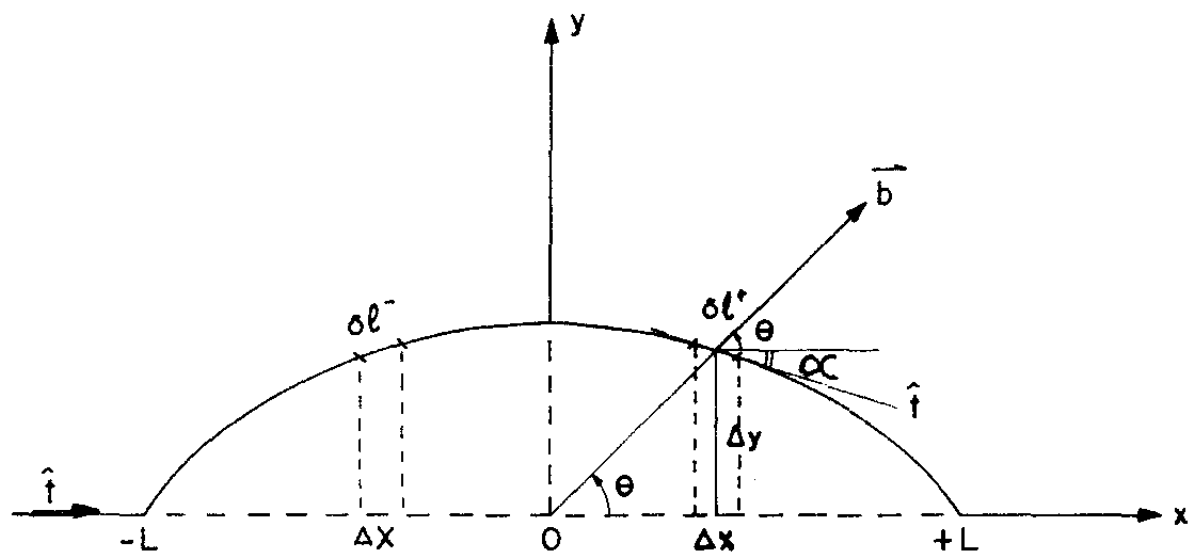


Fig. 8 - Dislocação encurvada. O vetor de Burgers forma um ângulo θ com a configuração reta original.

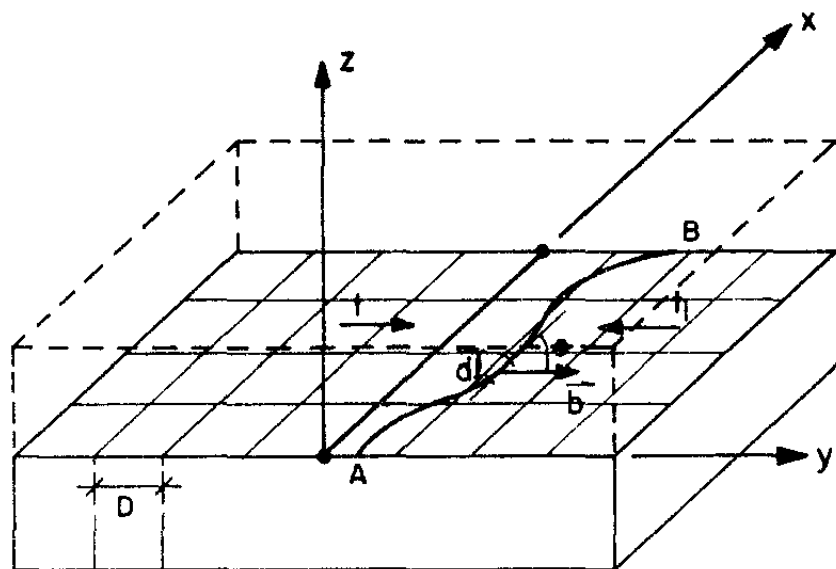


Fig. 9 - Aspecto da configuração assumida pela dislocação no plano do deslizamento, sob a ação da tensão atuante.

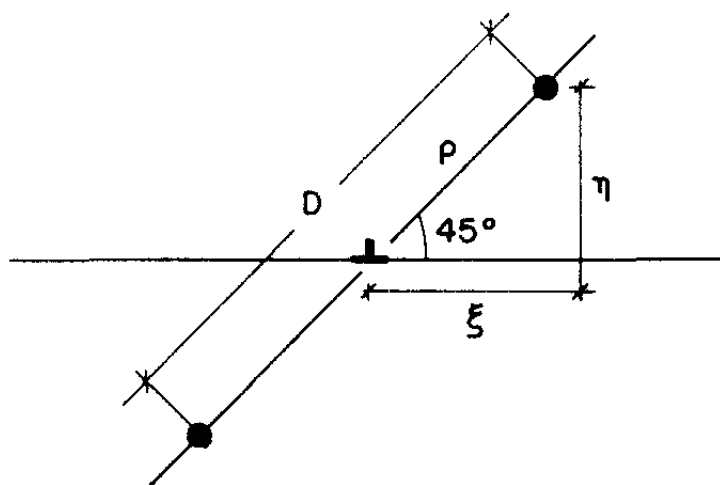


Fig. 10 - Distribuição ordenada de precipitados usada no cálculo de $\bar{\sigma}_i$.

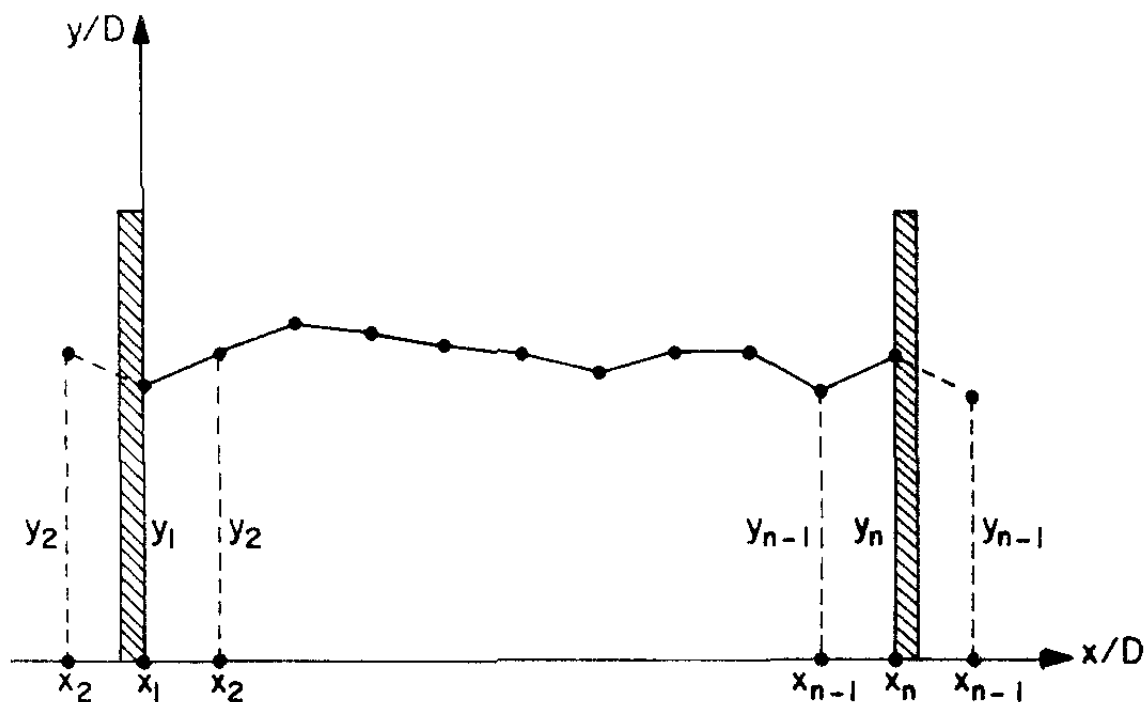


Fig. 12 - Condições de contorno empregadas nos cálculos da simulação - Imagem especular.

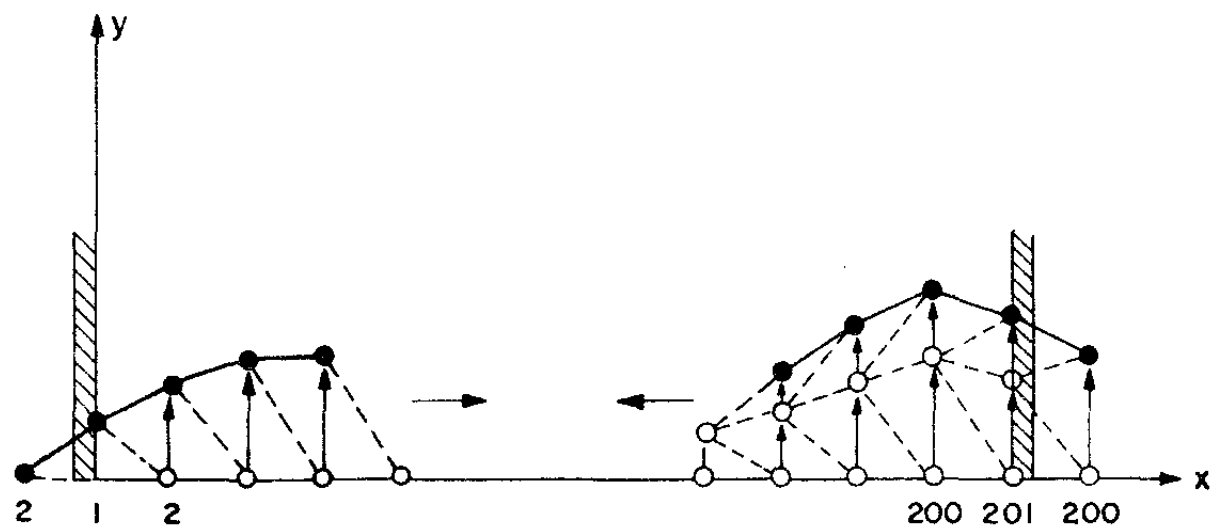


Fig. 13 - Interpretação geométrica do primeiro método idealizado para simular o movimento da dislocação.

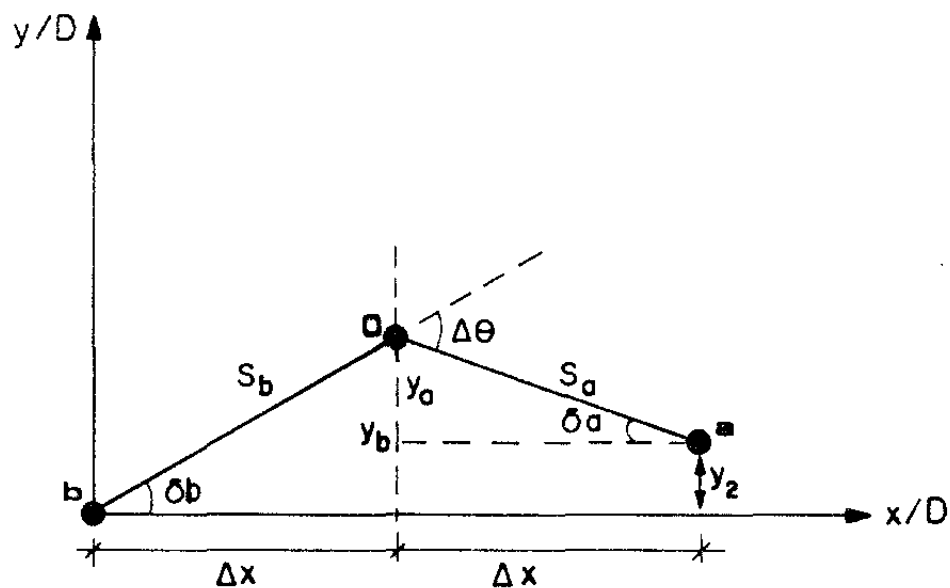


Fig. 14 - Interpretação geométrica de um outro método usado no estudo do movimento da dislocação.

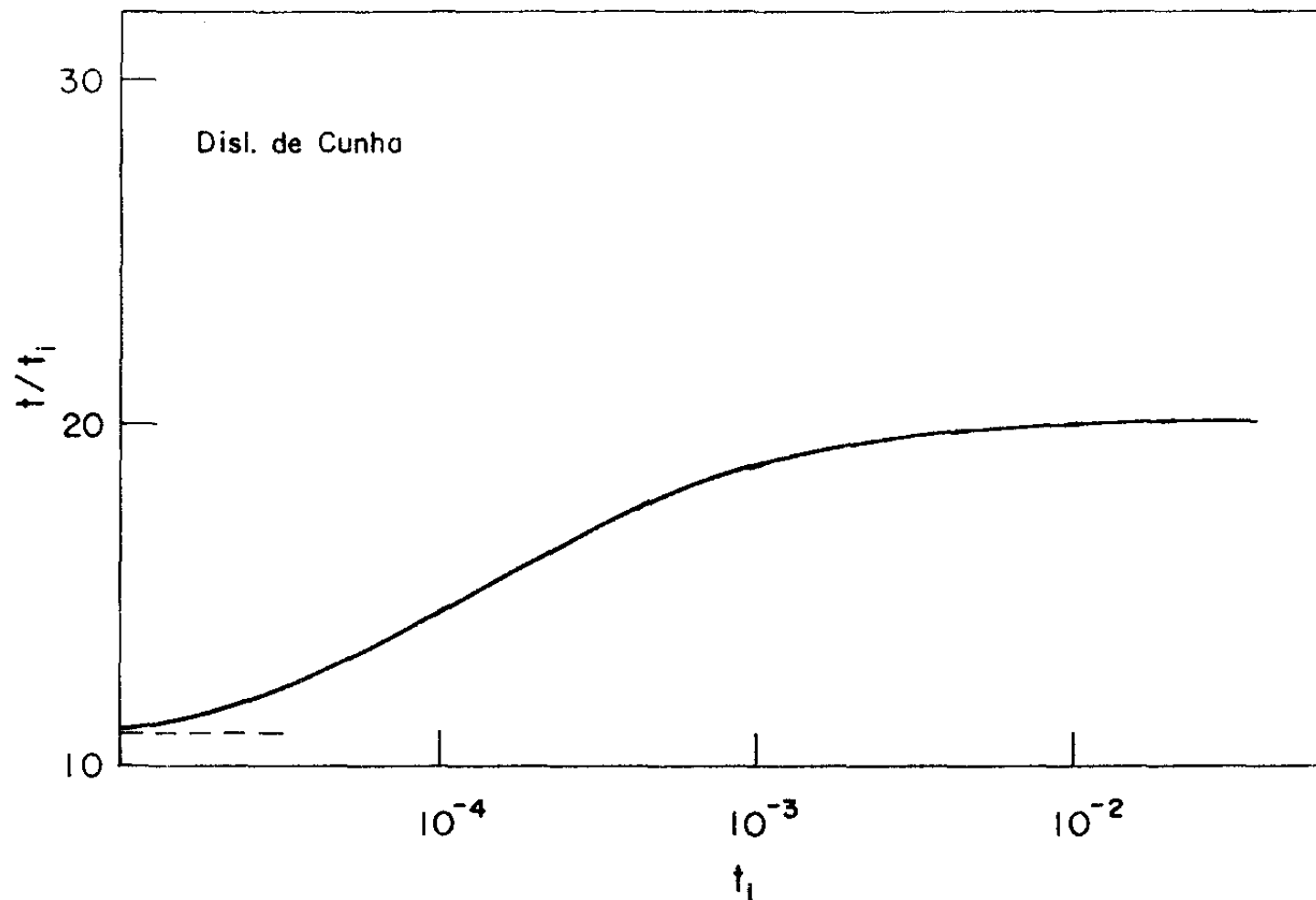


Fig. 15 - Aspecto gráfico da variação de relação t/t_i em função de t_i para a dislocação de cunha.

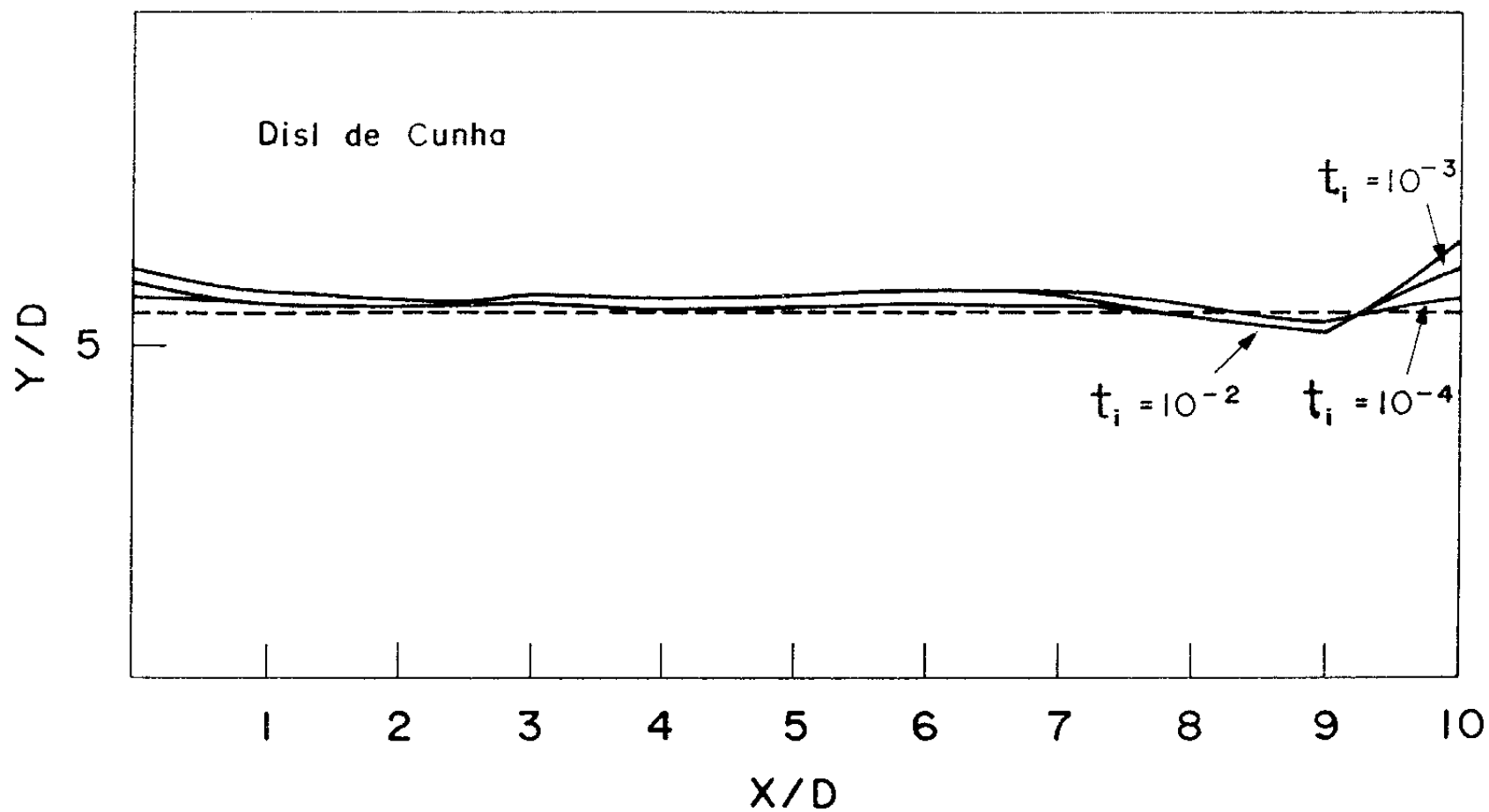


Fig. 16 - Configurações estáveis assumidas pela dislocação para distintos valores de t_i , no caso de uma dislocação de cunha.

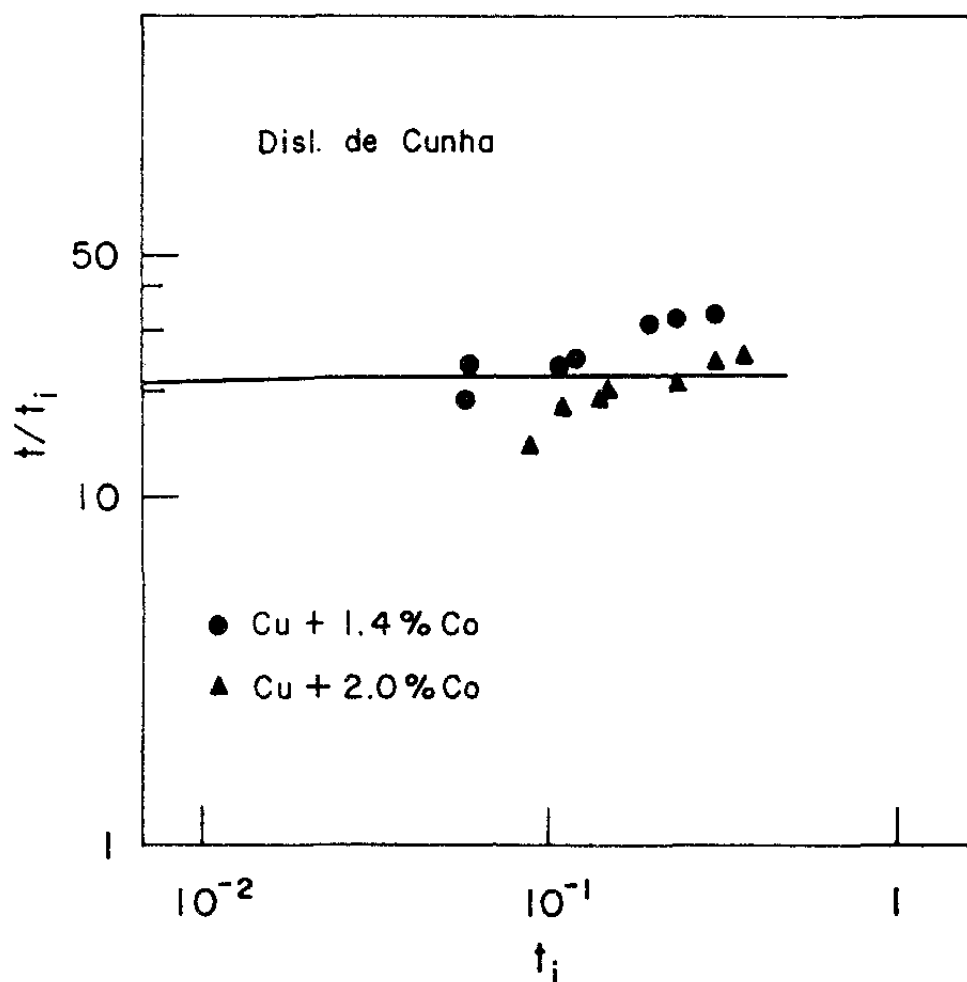


Fig. 17 - Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de Cu-Co, para o caso de uma dislocação de cunha.

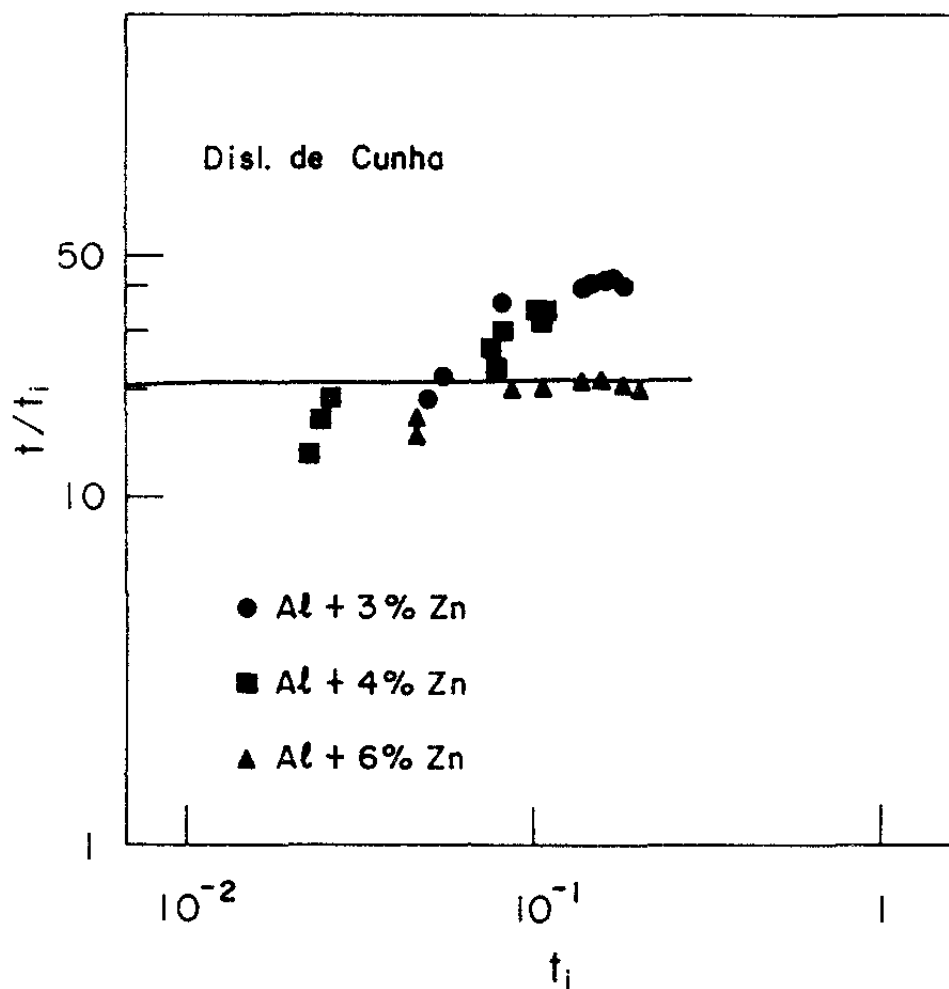


Fig. 18 - Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de Al-Zn, para o caso de uma dislocação de cunha.

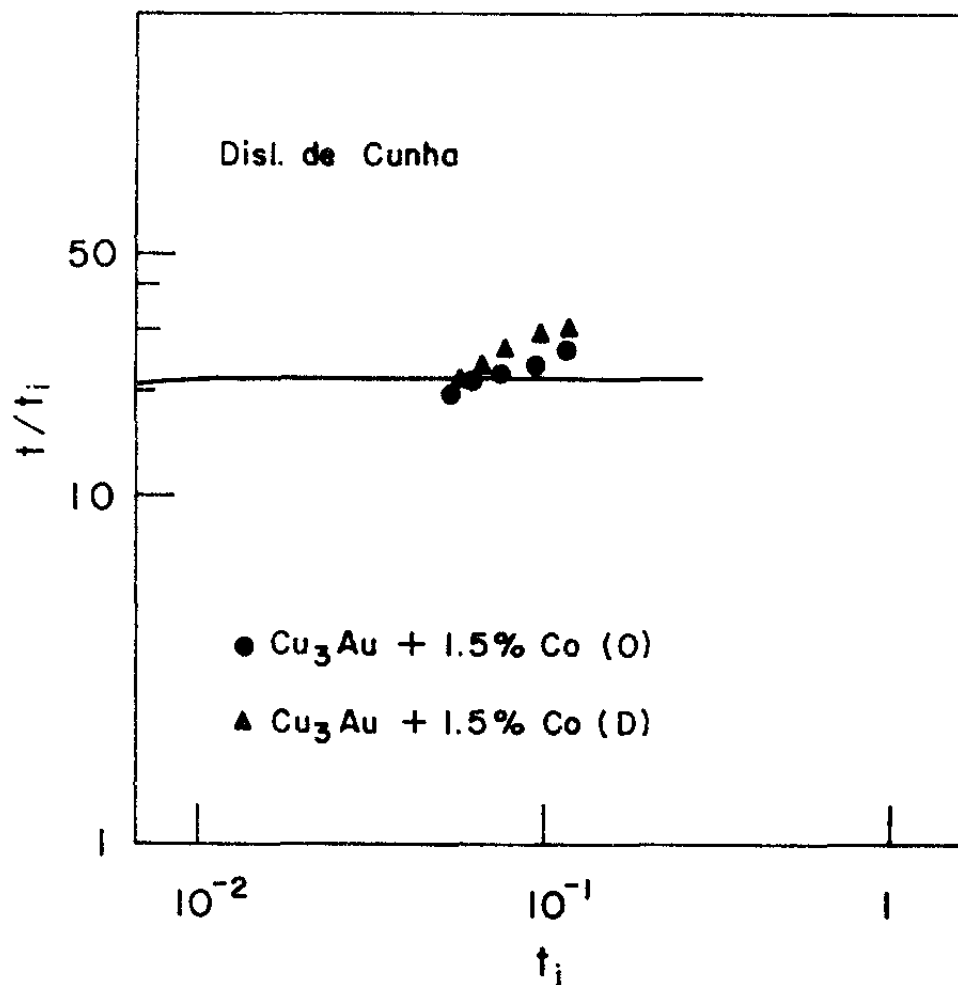


Fig. 19 - Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de $\text{Cu}_3\text{Au-Co}$, com estruturas ordenadas(O) e desordenada(D), para o caso de uma dislocação de cunha.

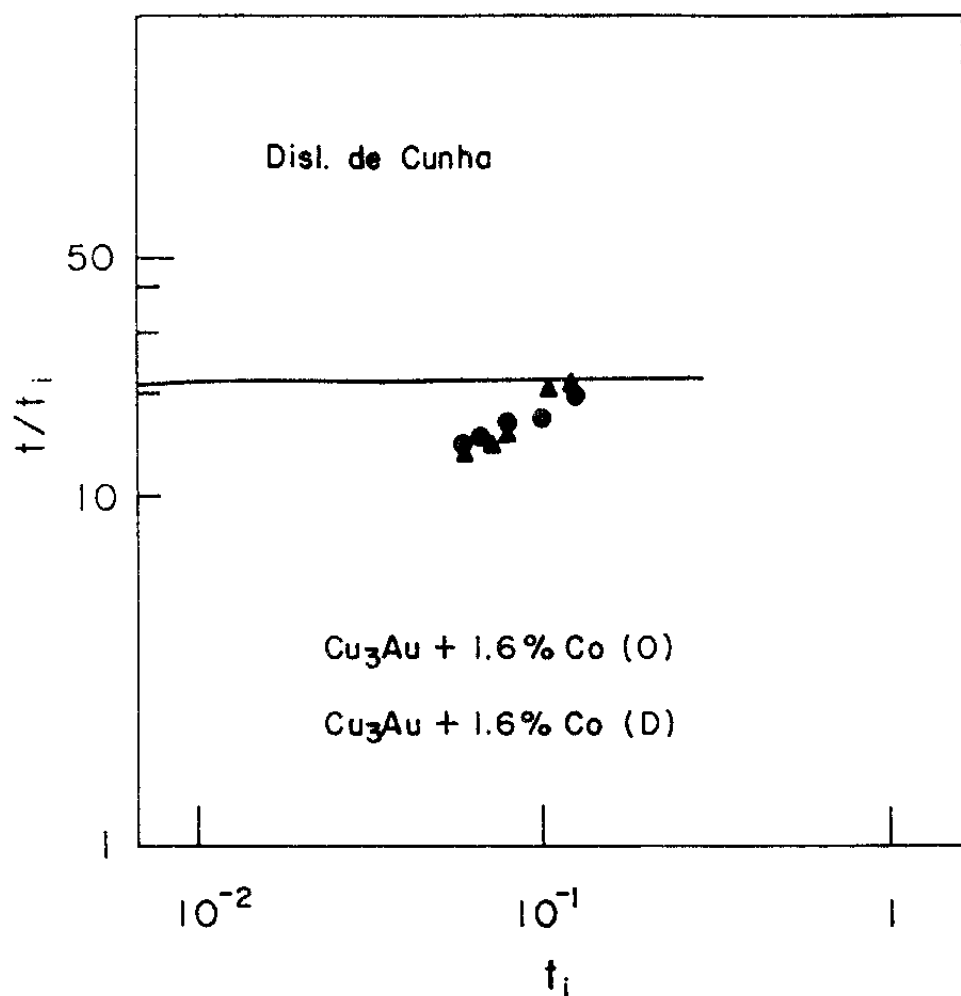


Fig. 20 - Comparação de resultados simulados com dados experimentais para ligas de $\text{Cu}_3\text{Au-Co}$, com estruturas ordenada(O) e desordenada(D), para o caso de uma dislocação de cunha.

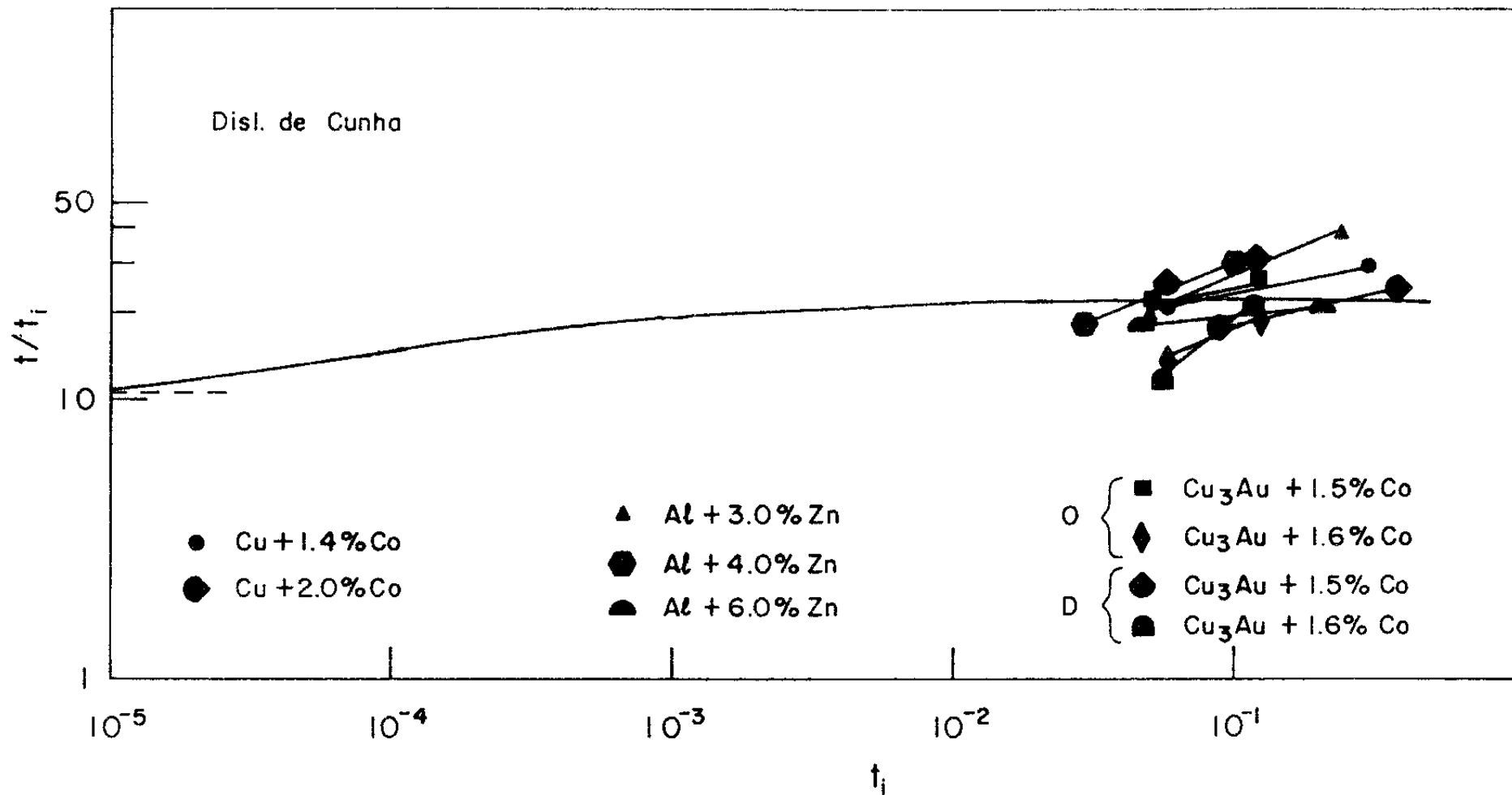


Fig. 21 - Normalização dos dados experimentais à curva padrão dos resultados simulados.

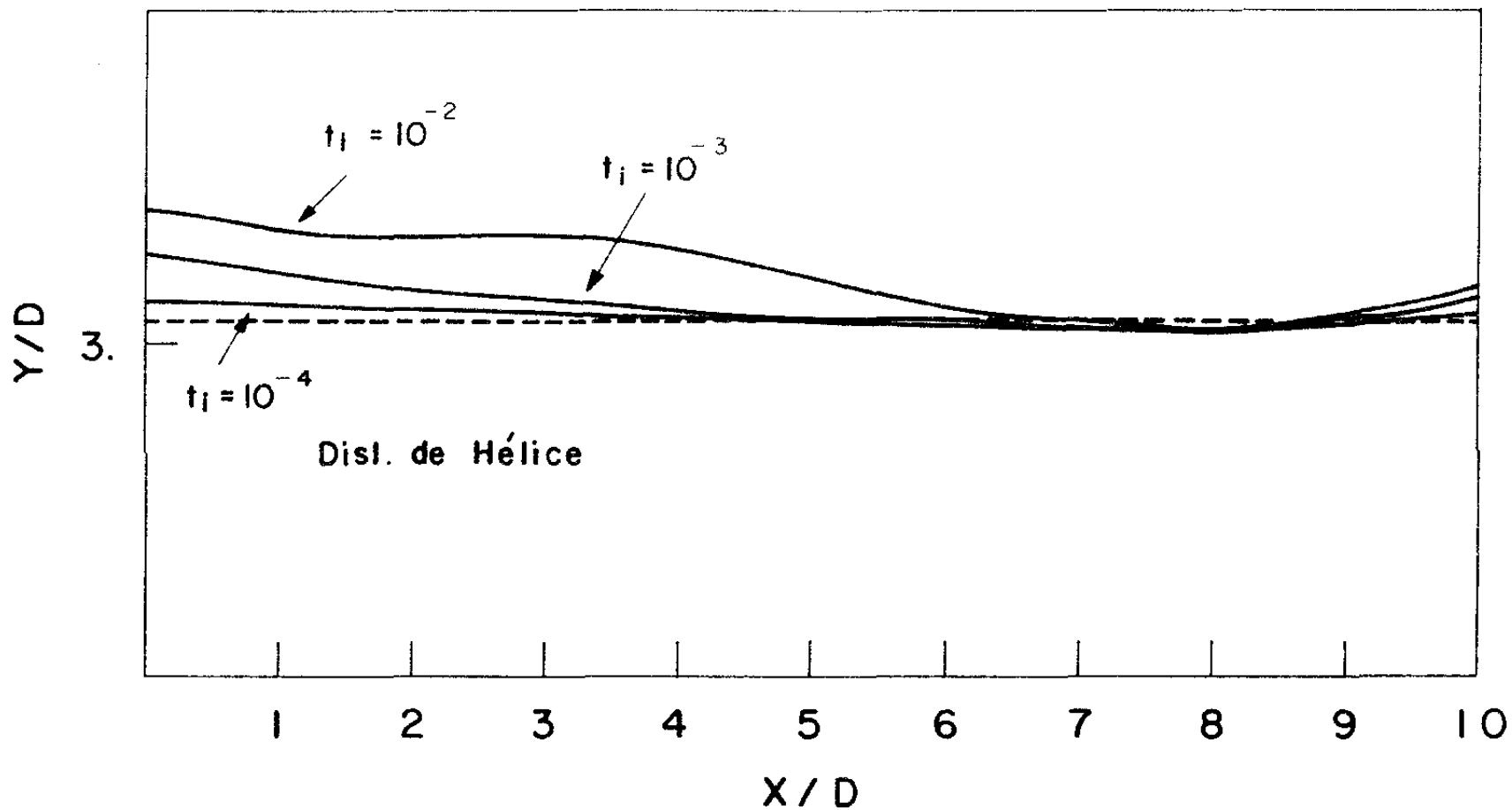


Fig. 22 - Configurações estáveis assumidas pela dislo_ cação de hélice, para distintos valores de t_i .

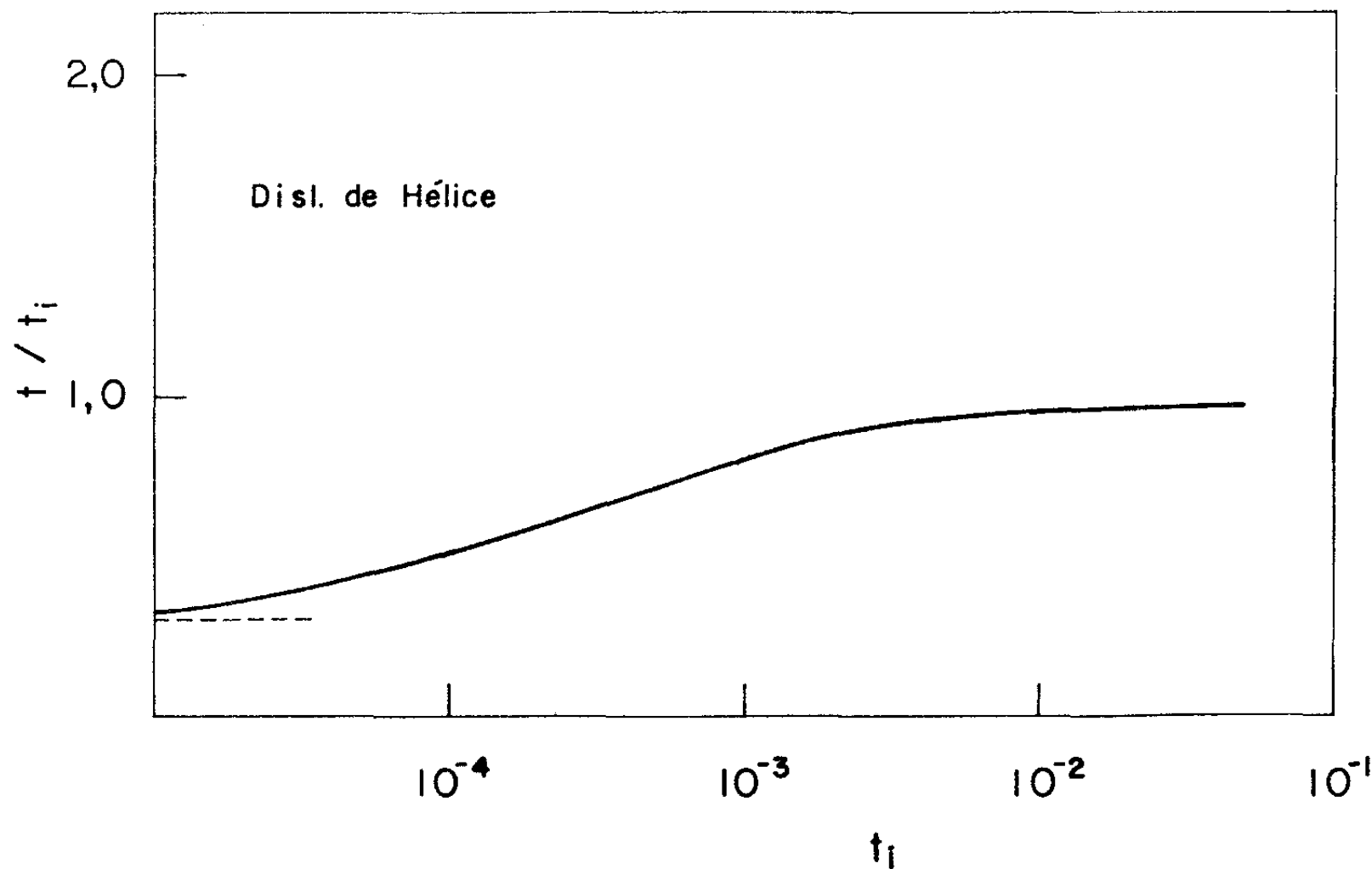


Fig. 23 - Aspecto gráfico da variação da relação t/t_i em função de t_i , para a dislocação de hélice.

A P P E N D I C E

```

C
C   MATRIZ.F4
C
C   OBJETIVO:
C       FAZER A DISTRIBUICAO ALEATORIA DE CENTROS DE DILATA
C       CAO.
C
C   DESCRICAO DOS PARAMETROS:
C       M      - CARACTERIZA A DISTRIBUICAO
C       NUM1 - NUMERO DE CELULAS NA DIRECAO X
C       NUM2 -                               Y
C       NUM3 -                               Z
C       X      - COORDENADA DO CENTRO DE DILATACAO NA CELULA
C       Y      -
C       Z      -
C
C   DIMENSION X(3000),Y(3000),Z(3000)
C
C   CARACTERIZACAO DA ESTRUTURA
C
C   TYPE 20
20  FORMAT( 'QUAL O VALOR DE M: ', $ )
    ACCEPT 21,M
21  FORMAT(G)
C
C   CONSTRUCAO DO ARRANJO ALEATORIO
C
    NUM1=10
    NUM2=20
    NUM3=3
    NUM=NUM1*NUM2*NUM3
    NM=0
    NN=0
    NP=0
    CALL OFILE(3,'ES1')
33  DD=1973+(M-1)*3920/20.0
    NNN=DD
    WRITE(3,200)NUM1,NUM2,NUM3,NUM,NNN
    CALL SETRAN(DD)
    DO 1 I=1,NUM
    IF(NM.EQ.NUM1)GO TO 2
4   X(I)=RAN(A)
    IF(X(I).LT.1.0)GO TO 6
    X(I)=0.0
6   X(I)=X(I)+NM
    NM=NM+1

```

```

      IF(NN.EQ.NUM2)GO TO 3
5     Y(I)=RAN(B)
      IF(Y(I).LT.1.0)GO TO 7
      Y(I)=0.0
7     Y(I)=Y(I)+NN-10.0
      Z(I)=RAN(C)
      IF(Z(I).LT.1.0)GO TO 8
      Z(I)=0.0
8     Z(I)=Z(I)+NP-1.5
      IF(ABS(Z(I)).GE.0.1)GO TO 10
      IF(Z(I).GE.0.0)GO TO 9
      Z(I)=-0.1
      GO TO 10
9     Z(I)=0.1
      GO TO 10
2     NM=0
      NN=NN+1
      GO TO 4
3     NN=0
      NP=NP+1
      GO TO 5
10    WRITE(3,100)X(I),Y(I),Z(I)
1     CONTINUE
      END FILE 3
      TYPE 30
30    FORMAT( 'PARA CONTINUAR BATA 1, PARA PARAR 0: ', )
      ACCEPT 31,M
31    FORMAT(G)
      IF(M.EQ.0)GO TO 32
      CALL OFILE(3,'ES2')
      GO TO 33
32    CONTINUE
100   FORMAT(5X,3(10X,E11.4))
200   FORMAT(5X,5(5X,I5))
      CALL EXIT
      END

```

```

C
C   AUXIL.F4
C
C   OBJETIVO:
C       CRIAR UMA LINHA DE DISLOCACAO RETA DENTRO DO ARRANJO
C       ESPACIAL DE CENTROS DE DILATAÇAO.
C
C   DESCRICAO DOS PARAMETROS:
C       XX(I) : ABCISSA DE UM PONTO DA LINHA DE DISLOCACAO
C       YY(I) : ORDENADA
C
C   DIMENSION XX(600),YY(600)
C
C   CONSTRUCAO DA RETA
C
C   TYPE 10
10  FORMAT( 'QUAL A POSICAO DA LINHA: ', )
    ACCEPT 11,M
11  FORMAT(G)
    CALL OFILE(3,'RE1')
33  DO 20 I=1,201
    XX(I)=(I-1)/20.0
    YY(I)=M
    WRITE(3,100)I,XX(I),YY(I)
20  CONTINUE
    END FILE 3
    TYPE 30
30  FORMAT( 'PARA CONTINUAR BATA 1, PARA PARAR 0: ', )
    ACCEPT 31,M
31  FORMAT(G)
    IF(M.EQ.Q)GO TO 32
    CALL OFILE(3,'RE2')
    GO TO 33
32  CONTINUE
100 FORMAT(5X,15,2(4X,E12.5))
    CALL EXIT
    END

```

```

C
C   RETA.F4
C
C   OBJETIVO:
C       DETERMINAR A TENSAO DE FLUXO PARA O CASO DE UMA DIS
C       LOCACAO RETA, COM CARACTER INICIAL DE CUNHA(HELICE)
C
C   METODO EMPREGADO:
C       PROGRAMA CAMPO.F4 MODIFICADO PARA INCLUIR A TENSAO
C       APLICADA.
C
C   DESCRICAO DOS PARAMETROS:
C       DESCRITOS NOS PROGRAMAS ANTERIORES.
C
C       DIMENSION X(3000),Y(3000),Z(3000),YY(600)
100  FORMAT(5X,3(10X,E11.4))
200  FORMAT(5X,5(5X,I5))
300  FORMAT(///,22X,'C R S S   ( C U N H A )',///,6X,'NUME
IRO DE CELULAS NA DIRECAO X:NUM1=',I5,/,6X,'
1      Y:NUM2=',I5,/,6X,'
1      Z:NUM3=',I5,/)
400  FORMAT(1X, '.',5X,'TPI',7X, '.',7X,'TP',7X, '.',6X,'SUM'
1,7X, '.',7X,'YY',6X, '.')
500  FORMAT(1X, '.',1X,E12.5,2X, '.',2X,E12.5,2X, '.',2X,E12.
15,2X, '.',2X,E12.5,1X, '.')
600  FORMAT(' ENTRE COM UM VALOR PARA RTP:', )
700  FORMAT(G)
800  FORMAT(/,' DESEJA CONTINUAR ? ',/,1X,'BATA 1 PARA CON
1TINUAR OU 2 PARA PARAR',/, )
900  FORMAT(///,16X,'E T A P A   C O N C L U I D A',//)
WRITE(5,100)
WRITE(5,100)
TYPE 600
ACCEPT 700,RTP
AMBUR=20
TPI=0.01
CALL IFILE(3,'ES1')
READ(3,200)NUM1,NUM2,NUM3,NUM,NNN
DO 1 I=1,NUM
1  READ(3,100)X(I),Y(I),Z(I)
WRITE(5,300)NUM1,NUM2,NUM3
NULL=(NUM1*AMBUR)+1
DO 2 I=1,NULL
2  YY(I)=5.48
10  TP=RTP*TPI
TCFI=0.0

```

```

PA=0.1
PI=0.1
WRITE(5,400)
8  SUM=0.0
   DO 3 I=1,NU11
   YY(I)=YY(I)+PI-PA
   STRI=0.0
   DO 4 J=1,NUM
   A=(I-1)/AMBUR-X(J)
   B=YY(I)-Y(J)
   C=-Z(J)
   IF(ABS(A).GT.1.5)GO TO 4
   IF(ABS(B).GT.1.5)GO TO 4
   DIS=SQRT((A**2+B**2+C**2)*.5)
   STRI=STRI+TPI*B*C/DIS
4  CONTINUE
   SUM=SUM+STRI+TP
3  CONTINUE
   WRITE(5,500)TPI,TP,SUM,YY(1)
   IF(YY(1).GT.6.0)GO TO 9
   IF(SUM.LT.0.001)GO TO 11
13 AA=1.0
   IF(ABS(PI).GT.0.0005)GO TO 6
   GO TO 5
6  PA=0.0
   BB=TCFI*SUM
   IF(BB.GE.0.0)GO TO 7
   PI=PI+0.5
7  CC=SIGN(AA,SUM)
   PI=CC*ABS(PI)
   GO TO 8
5  RTP=RTP+1.0
   WRITE(5,100)
   GO TO 10
11 TYPE 800
   ACCEPT 700,N
   IF(N.EQ.2)GO TO 12
   GO TO 13
9  WRITE(5,900)
12 CALL EXIT
   END

```

```

C
C      FLEX.F4
C
C      OBJETIVO:
C          DETERMINAR A TENSÃO DE FLUXO PARA O CASO DE UMA DIS
C          LOCAÇÃO FLEXÍVEL, COM CARACTER INICIAL DE CUNHA(HELI
C          CE).
C
C      METODO EMPREGADO:
C          O USADO NO PROGRAMA TMAX.F4
C
C          DIMENSION X(1000),Y(1000),Z(1000)
C          DIMENSION XX(600),YY(600),XXX(600),YYY(600)
C          COMMON TPI, NULL, NUM, TP
C
C          100  FORMAT(5X,3(10X,E11.4))
C          150  FORMAT(5X,4(5X,E11.4))
C          200  FORMAT(5X,5(5X,I5))
C          250  FORMAT(4X,I5,4(4X,E12.5))
C          300  FORMAT(5X,I5,2(4X,E12.5))
C          350  FORMAT('HA PROBLEMA NO PONTO',/,2X,'I=',I5,'ALFA=',E11
C          1.4,2X,'DIF=',E11.4)
C          400  FORMAT(25X,' SUM TOTAL = ',E13.6)
C
C      ENTRADA DOS DADOS
C
C          CALL IFILE(3,'ES1')
C          READ(3,200)NUM1,NUM2,NUM3,NUM,NNN
C          DO 1 I=1,NUM
C          1  READ(3,100)X(I),Y(I),Z(I)
C             WRITE(5,100)
C             WRITE(5,200)NUM1,NUM2,NUM3,NUM,NNN
C             WRITE(5,100)
C             L=0
C             AMBUR=20
C             RTP=10.0
C             TPI=0.01
C             TP=TPI RTP
C             WRITE(5,150)AMBUR,TPI,RTP,TP
C             NULL=NUM1*AMBUR+1
C             CALL IFILE(3,'RE1')
C             DO 9 I=1,NULL
C          9  READ(3,300)N,XX(I),YY(I)
C
C      DETERMINAÇÃO DA TENSÃO DE FLUXO
C

```

```

      COV=YY(I)
      MM=0
      M=0
15    DO 2 I=1,NU11
      DOF=0.8
      ALFA=0.0
3     CALL ANGULO(XX,YY,X,Y,Z,ALFA,I,AFLA)
      DIF=ALFA-AFLA
      ALFA=AFLA
      IF(ABS(DOF).GT.ABS(DIF))GO TO 50
      WRITE(5,100)
      WRITE(5,350)I,ALFA,DIF
      WRITE(5,100)
      GO TO 55
50    DOF=DIF
      IF(ABS(DIF).GT.ABS(0.01))GO TO 3
2     CONTINUE
      DO 10 I=1,NU11
      XXX(NU11-I+1)=-XX(I)
      YYY(NU11-I+1)=YY(I)
10    CONTINUE
      DO 11 I=1,NU11
      INV=NU11-I+1
      DOF=0.8
      ALFA=0.0
13    CALL ANGULO(XXX,YYY,X,Y,Z,ALFA,I,AFLA)
      DIF=ALFA-AFLA
      IF(ABS(DOF).GT.ABS(DIF))GO TO 49
      WRITE(5,350)INV,ALFA,DIF
      GO TO 55
49    DOF=DIF
      IF(ABS(DIF).GT.ABS(0.01))GO TO 13
11    CONTINUE
      M=M+1
24    DO 12 I=1,NU11
      XX(NU11-I+1)=-XXX(I)
      YY(NU11-I+1)=YYY(I)
12    CONTINUE
      IF(M.NE.10)GO TO 15
      CALL OFILE(3,'FL1')
      DO 35 I=1,NU11
35    WRITE(3,300)I,XX(I),YY(I)
      END FILE 3
      M=0
      WRITE(5,100)
      WRITE(5,100)

```

```

DO 22 I=1,NUll,10
22  WRITE(5,300)I,XX(I),YY(I)
    MM=MM+1
    IF(MM.EQ.5)GO TO 90
    GO TO 15
90  SUM=0.0
    DO 91 I=1,NUll
    CALL TENSAO(XX,YY,X,Y,Z,STR)
    SUM=SUM+STR
91  CONTINUE
    WRITE(5,400)SUM
    MM=0
    GO TO 15
55  CALL EXIT
    END

C
C  SUBROUTINE ANGULO
C    MOVIMENTA A DISLOCACAO
C

SUBROUTINE ANGULO(XX,YY,X,Y,Z,ALFA,I,AFLA)
DIMENSION XX(1),YY(1),X(1),Y(1),Z(1)
COMMON TPI,NUll,NUM,TP
STR=0.0
IF(I.NE.1)GO TO 2
BETA=0.0
DD=ABS(XX(2)-XX(1))
GO TO 3
2  IF(I.NE.NUll)GO TO 4
BETA=0.0
DD=ABS(XX(NUll)-XX(NUll-1))
GO TO 3
4  BETA=ATAN((YY(I+1)-YY(I-1))/(XX(I+1)-XX(I-1)))
DD=ABS((XX(I+1)-XX(I-1))/(2.0*COS(BETA)))
3  SS=DD/COS(ALFA/2.0)
DO 1 J=1,NUM
A=ABS(XX(I))-X(J)
B=YY(I)-Y(J)
C=-Z(J)
IF(ABS(A).GT.1.5)GO TO 1
IF(ABS(B).GT.1.5)GO TO 1
DIS=SQRT((A**2+B**2+C**2)**5)
STR=STR+TPI*B*C/DIS
1  CONTINUE
STR=STR+TP
AFLA=2.0*STR*SS
IF(I.NE.1)GO TO 5

```

```

YY(1)=YY(2)+SS*SIN(AFLA/2.0)
GO TO 7
5 IF(I.NE.NULL)GO TO 6
  YY(NULL)=YY(NULL-1)+SS*SIN(AFLA/2.0)
  GO TO 7
6 XX(I)=XX(I-1)+SS*COS(AFLA/2.0+BETA)
  YY(I)=YY(I-1)+SS*SIN(AFLA/2.0+BETA)
7 CONTINUE
  RETURN
  END

C
C SUBROUTINE TENSAO
C   CALCULA A TENSAO ATUANTE SOBRE A DISLOCACAO
C

SUBROUTINE TENSAO(XX,YY,X,Y,Z,I,STR)
DIMENSION X(1),Y(1),Z(1),XX(1),YY(1)
COMMON TPI,NULL,NUM,TP
STR=0.0
IF(I.EQ.1)GO TO 1
IF(I.EQ.NULL)GO TO 2
  ANG1=ATAN((YY(I)-YY(I-1))/(XX(I)-XX(I-1)))
  ANG2=ATAN((YY(I 1)-YY(I))/(XX(I 1)-XX(I)))
  D1=SQRT((YY(I)-YY(I-1))**2+(XX(I)-XX(I-1))**2)
  D2=SQRT((YY(I 1)-YY(I))**2+(XX(I 1)-XX(I))**2)
  DANG=ANG1/D1
  GO TO 3
2 ANG2=ATAN((YYNULL-1)-YY(NULL))/(XX(NULL)-XX(NULL-1)))
  DANG=ANG2/D2
3 DO 4 J=1,NUM
  A=XX(I)-X(J)
  B=YY(I)-Y(J)
  C=-Z(J)
  IF(ABS(A).GT.1.5)GO TO 4
  IF(ABS(B).GT.1.5)GO TO 4
  DIS=SQRT((A**2+B**2+C**2)**5)
  STR=STR+TPI*B*C/DIS
4 CONTINUE
  RETURN
  END

```