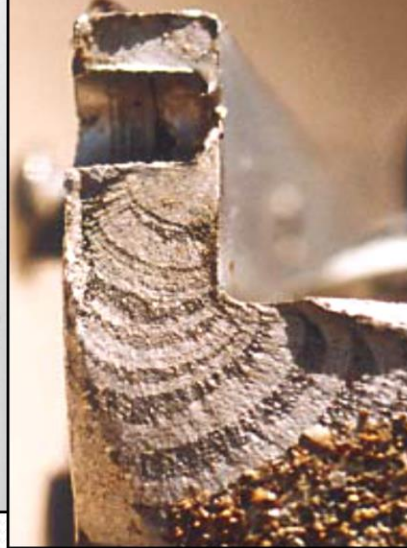


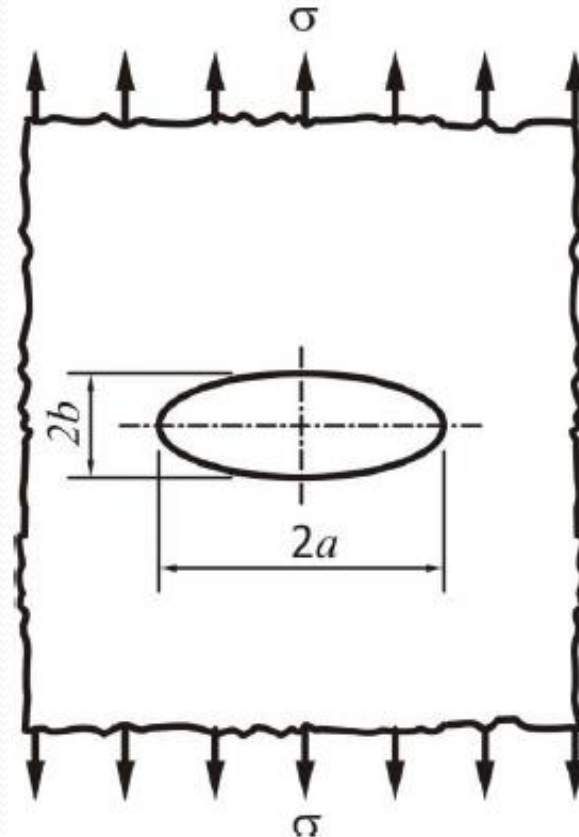
SMM0330 - PRINCÍPIO DE ANÁLISE DE FALHAS EM COMPONENTES



**FRATURA É UM TIPO
DE FALHA**

CONTRIBUIÇÃO DE INGLIS (1913)

- Após o afundamento do **Titanic (1912)**;
- **Marco inaugural da Mecânica da Fratura**;
- **Furo elíptico de eixos $2a$ e $2b$** em uma placa sujeita à tensão uniforme σ ;



CONTRIBUIÇÃO DE INGLIS (1913)

- Encontrou uma expressão simples para a **tensão máxima** nas extremidades do eixo maior desse furo:

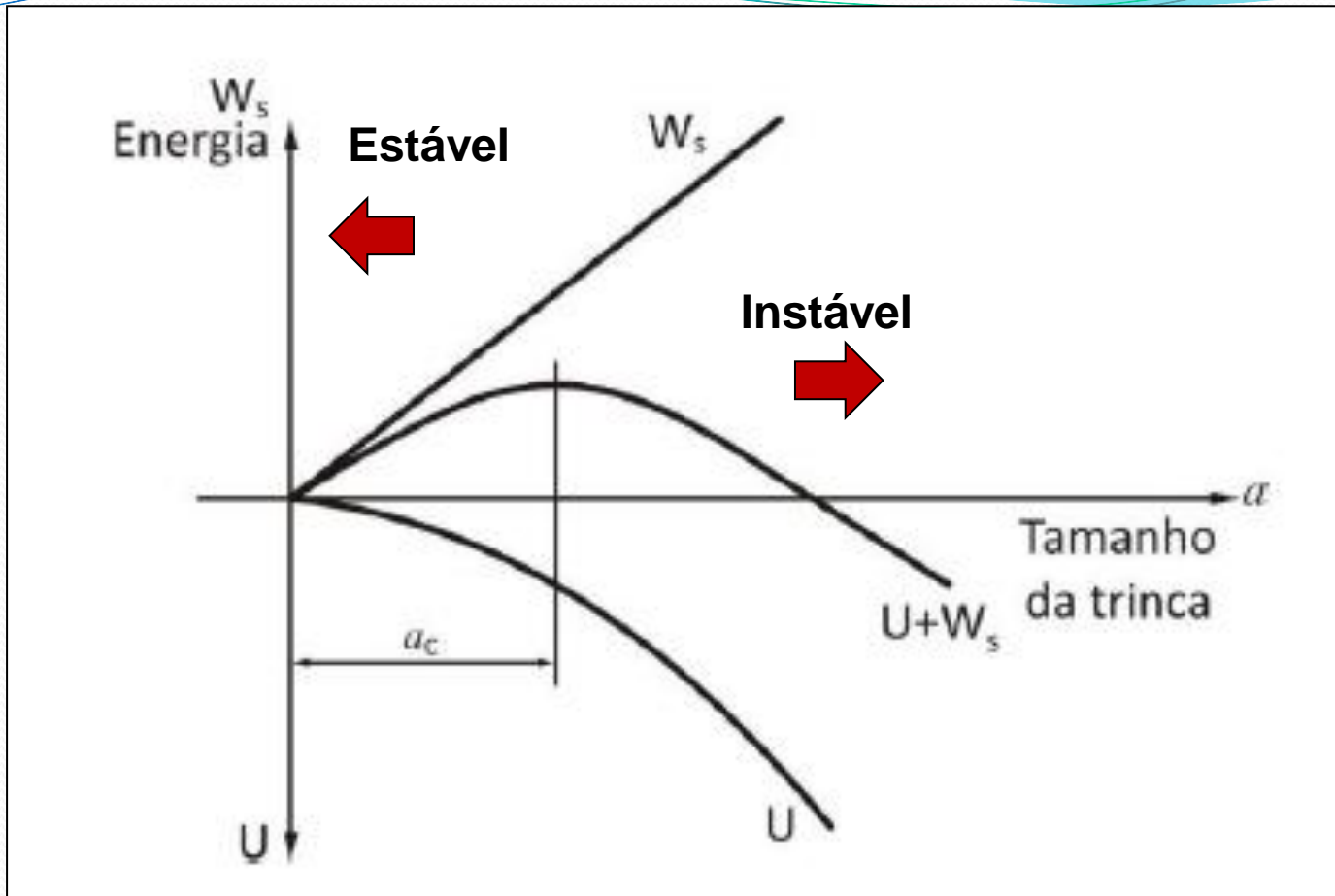
$$\sigma_{\max} = \sigma \left(1 + \frac{2a}{b} \right) = \sigma \left(1 + 2 \left(\frac{a}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \right)$$

- onde ρ é o raio de curvatura, $\rho = b^2/a$;
- Para $a = b$, **furo redondo**, $\sigma_{\max} = 3\sigma$, sendo **3** o **fator de concentração** de tensão convencional para um furo redondo;
- **Trinca perfeitamente afiada** ($\rho \rightarrow 0$), a **tensão na ponta** da trinca tende ao **infinito**, resultado que, além de ser **fisicamente impossível**, levaria à **previsão errônea** de que os **materiais teriam resistência nula**.

GRIFFITH(1920)

- **The phenomena of rupture and flow in solids**, The Philosophical Transactions of the Royal Society A, v.221, p.163-198, **1920**;
- Trabalhou com **vidro**, fornecidos na forma de tubos de ensaio:
 - **SiO₂ - 69,2%**;
 - **K₂O - 12,0 %**;
 - **Na₂O - 0,9%**;
 - **Al₂O₃ 11,8 %**;
 - **CaO – 4,5 %** ;
 - **MnO – 0,9 %**.

BALANÇO ENERGÉTICO DE GRIFFITH



$$\frac{dW_s}{da} + \frac{dU}{da} < 0$$

Derivando as equações e substituindo:

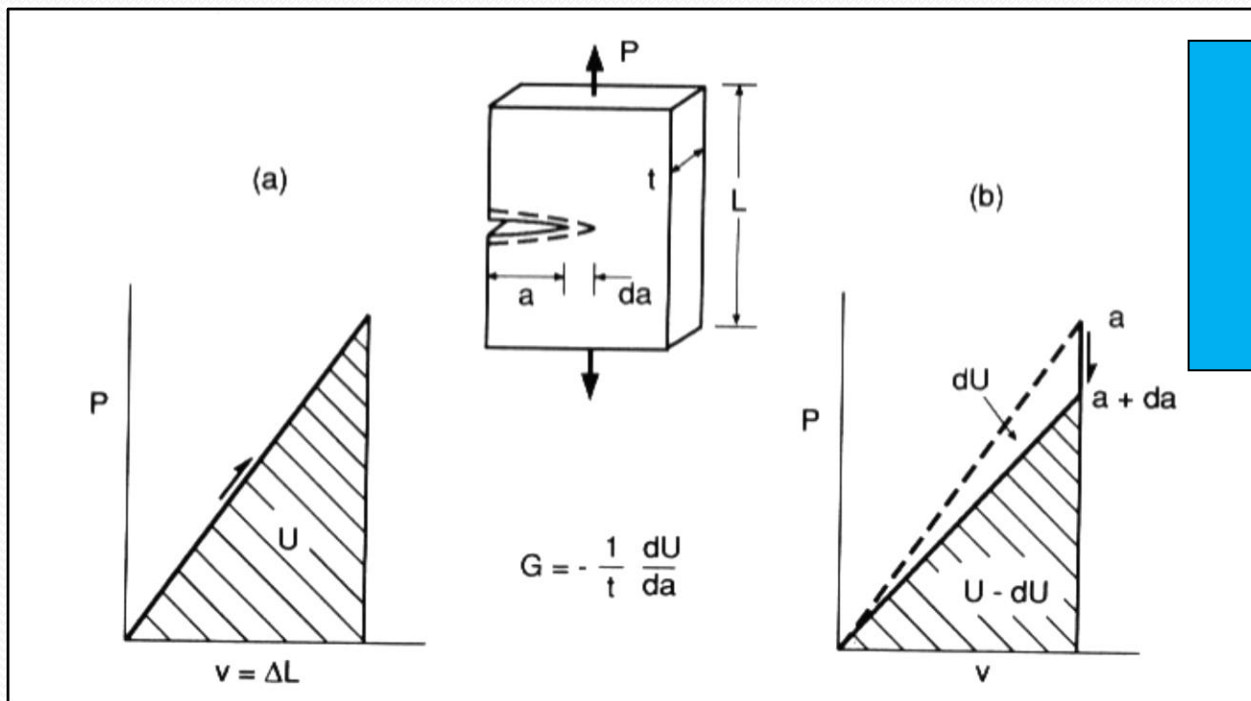
$$\sigma_c = \sqrt{\frac{2E\gamma_s}{\pi a}}$$

EGON OROWAN (1945)

- **Falha de Griffith: não** considera deformação plástica-considera os materiais absolutamente **frágeis**;
- Mesmo materiais **frágeis à olho nú**, como o **FoFo**, apresentam **deformação plástica** em escala **microscópica**;
- O critério de **Griffith** foi posteriormente aperfeiçoado, de forma **independente**, por **E. Orowan (1902-1989)** e **G. R. Irwin (1907-1998)** para considerar materiais que tenham algum grau de ductilidade;
- **Orowan** propôs que a deformação plástica estaria restrita a uma pequena região próxima à trinca e que geraria um trabalho (γ_p) e que γ_s poderia ser substituída por $\gamma_s + \gamma_p$, nas equações;
- **1955, Felbeck e Orowan** mostraram que γ_p é cerca de 1000 vezes maior que γ_s , indicando que, **na prática**, γ_s é **desprezível** no caso da **fratura de metais**.

IRWIN(1957)

- **Generalizou** o conceito reunindo todas as fontes de resistência ao crescimento da trinca em um único parâmetro, denominado **taxa de alívio de energia de deformação** e denotado por **Gc** (consta que a letra “G” é uma homenagem a Griffith);
- Quando a trinca se propaga (da), a rigidez do material decresce e a energia potencial decresce de dU ;
- G é a taxa de variação da energia potencial por unidade de área da trinca, a força motriz para a propagação da trinca: $G = - dU/tda$;



**COMPLIANCE:
INVERSO DA
RIGIDEZ
 $C = \Delta V / \Delta P$**

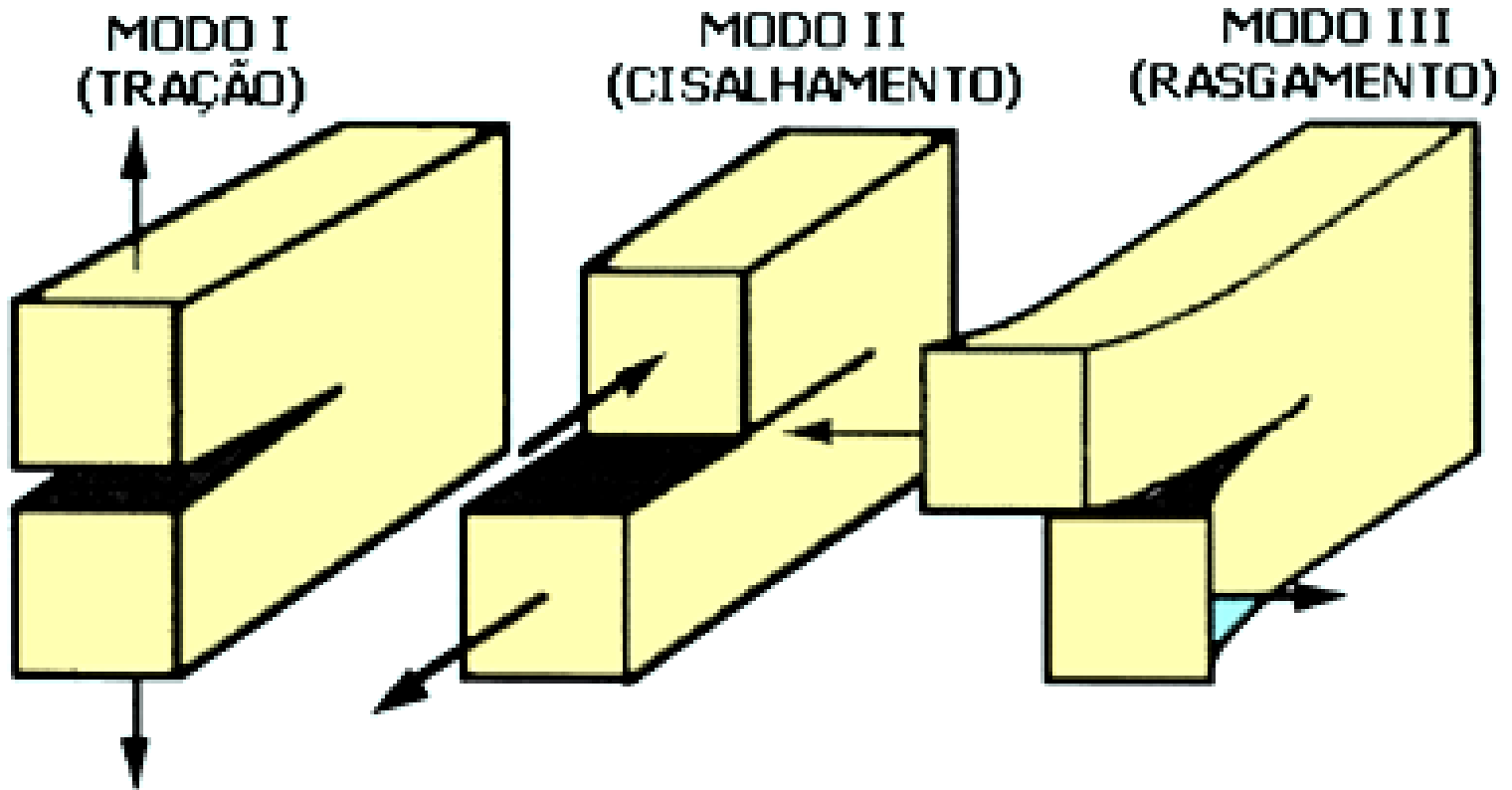
- G_c é um parâmetro de cada material;
- As expressões para σ_c e G_c correspondem ao estado plano de tensão;
- Podem ser convertidas para o estado de deformação plana (confinamento na direção da espessura) substituindo-se E por $E / (1 - \nu^2)$, onde ν é o coeficiente de Poisson

- **Existe uma taxa de variação da energia potencial por unidade de área crítica, G_c** (consta que a letra “G” é uma homenagem a Griffith), que separa a propagação estável da propagação instável (a_c);

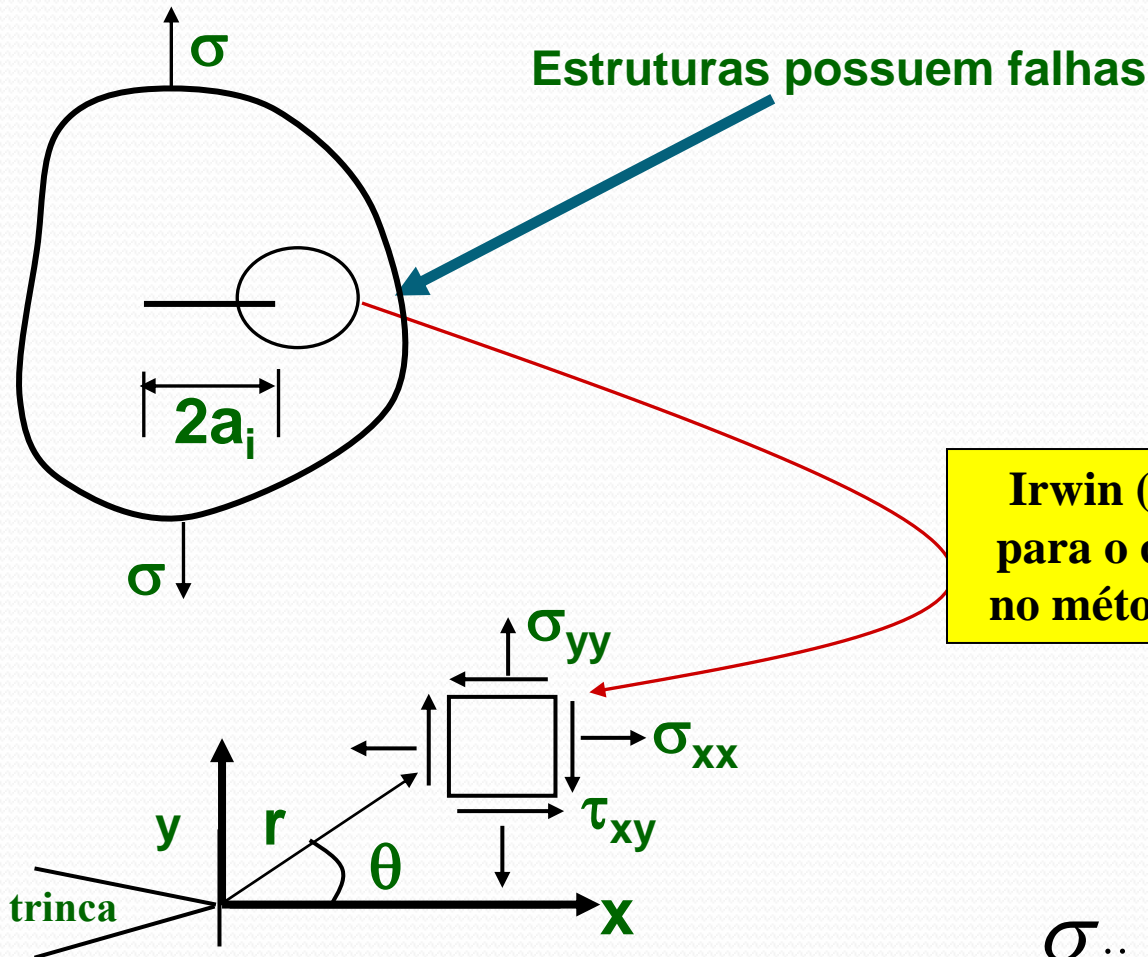
$$\sigma_c = \sqrt{\frac{2E(\gamma_s + \gamma_p)}{\pi a}} = \sqrt{\frac{EG_c}{\pi a}}$$

$$G_c = \frac{\sigma_c^2 \pi a}{E}$$

Conceitos da Mecânica da Fratura



Teoria do campo das tensões elásticas



Irwin (1957), obteve as equações para o campo de tensões, baseado no método de Westergaard (1930).

$$\sigma_{ij} = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}(\theta)$$

r e θ são coordenadas polares do ponto considerado e K é denominado de fator de intensidade de tensão.

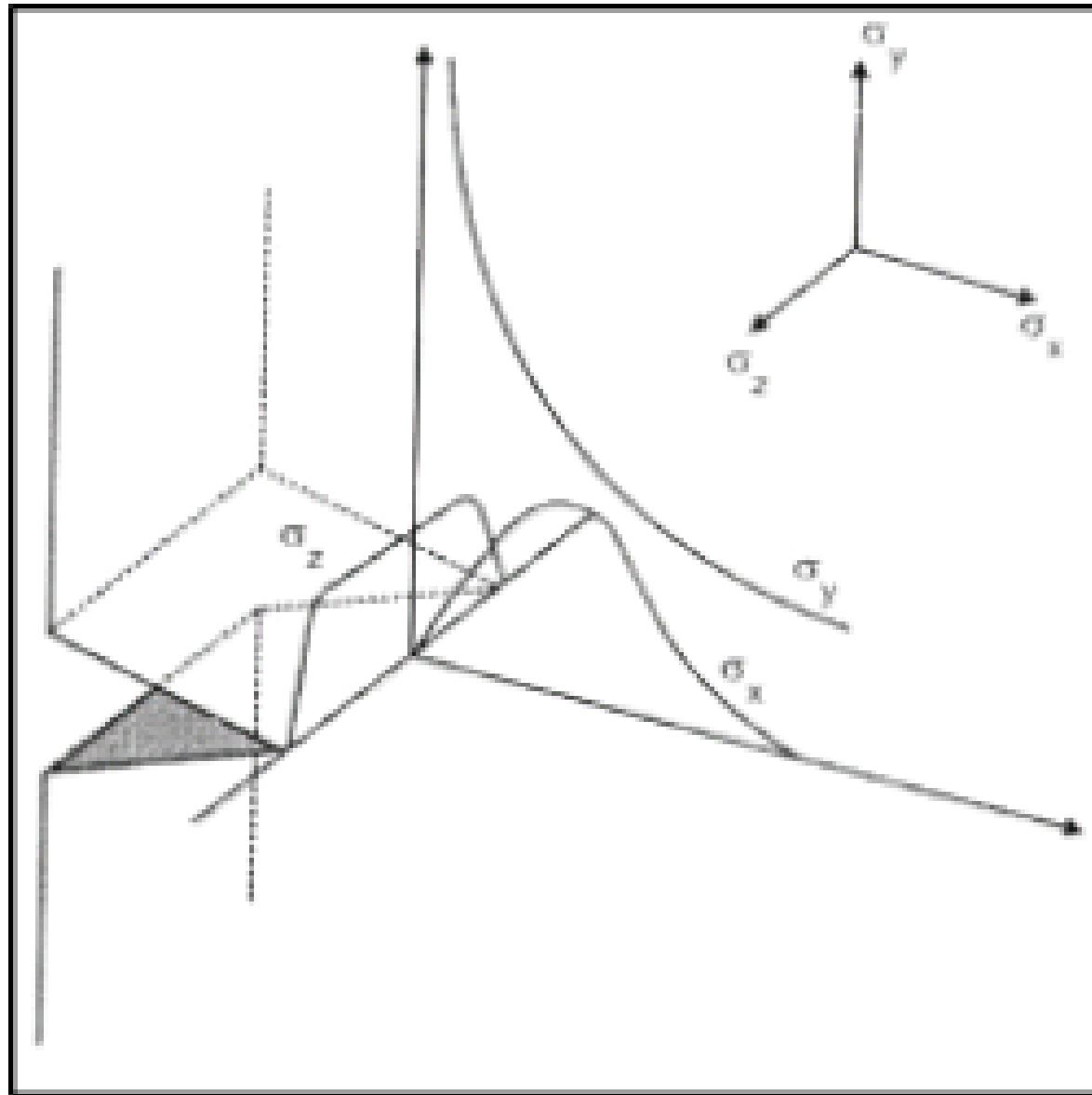
- Pelas equações anteriores, **todo o campo elástico fica conhecido** a partir do valor de $\sigma\sqrt{a}$;
- Irwin definiu o **fator intensidade de tensão**, representado pela letra **K**, para o caso da placa infinita e o relacionou ao **Gc**

$$K = \sigma\sqrt{\pi a}$$

$$\sigma(r, \theta) = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} f(\theta)$$

$$G_c = \frac{K^2}{E}$$

Estado triaxial de tensões provocado pela presença do entalhe



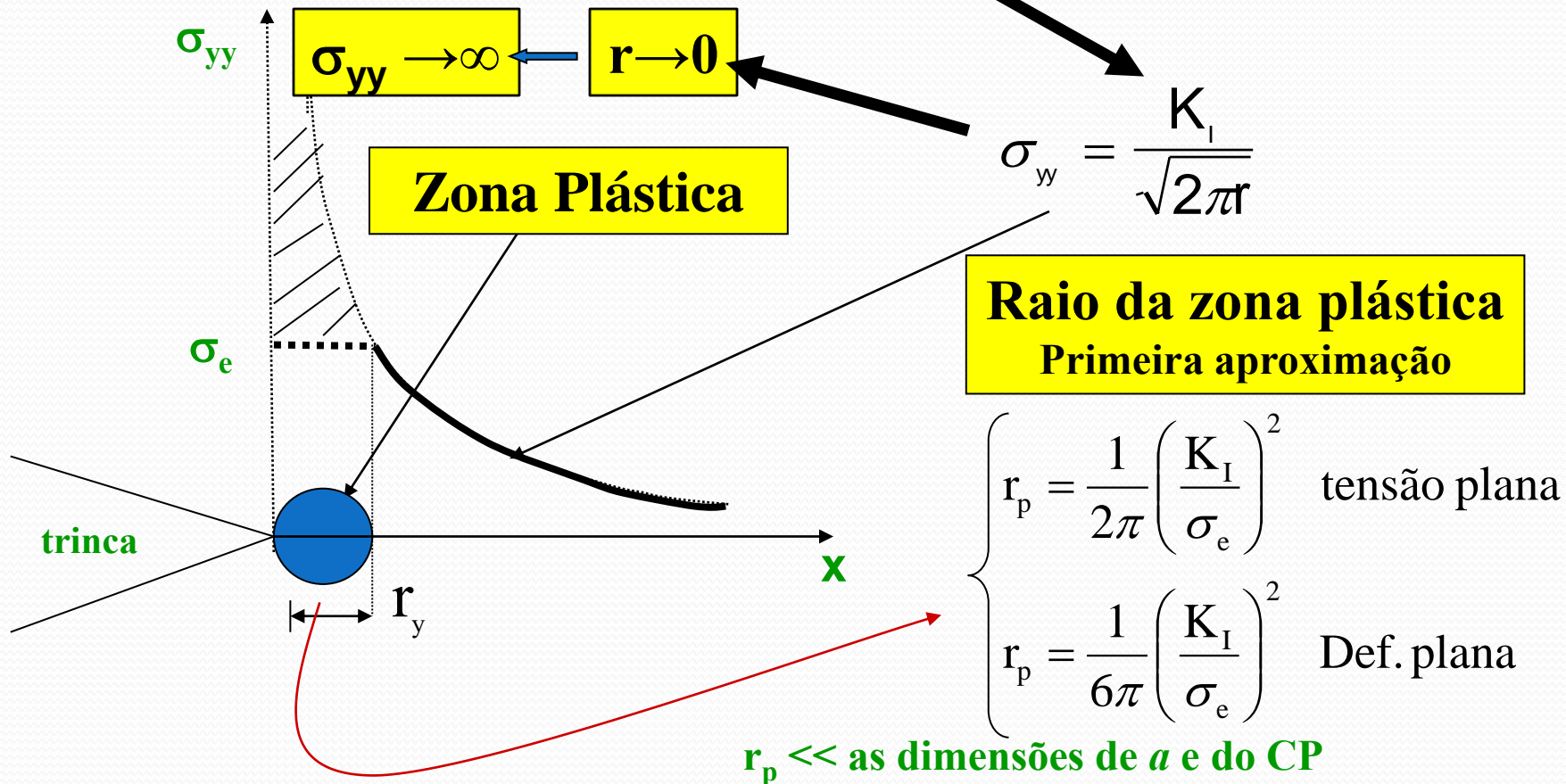
- Considerando sistema de referência x , y e z , sendo que x = **direção da largura**; y = **direção carga axial**; z = **direção da espessura**, como na figura ;
- **Na raiz do entalhe**, a **tensão axial em y é alta** e a amostra tenta **estricionar nas direções x e z** ;
- **Fora da raiz não há tensão axial aplicada nas superfícies livres**;
- O material **não tenta estricionar** nestas direções;
- Quando a **tensão na raiz do entalhe atinge o limite de escoamento**, ocorre a **plastificação na direção paralela ao eixo do carregamento**;
- Como há continuidade de material, haverá resistência à contração dentro do entalhe;
- Isto significa **restrição de deformação plástica em uma direção**, levando ao **estado de deformação plana** e, conseqüentemente, ao **estado triaxial de tensões**.

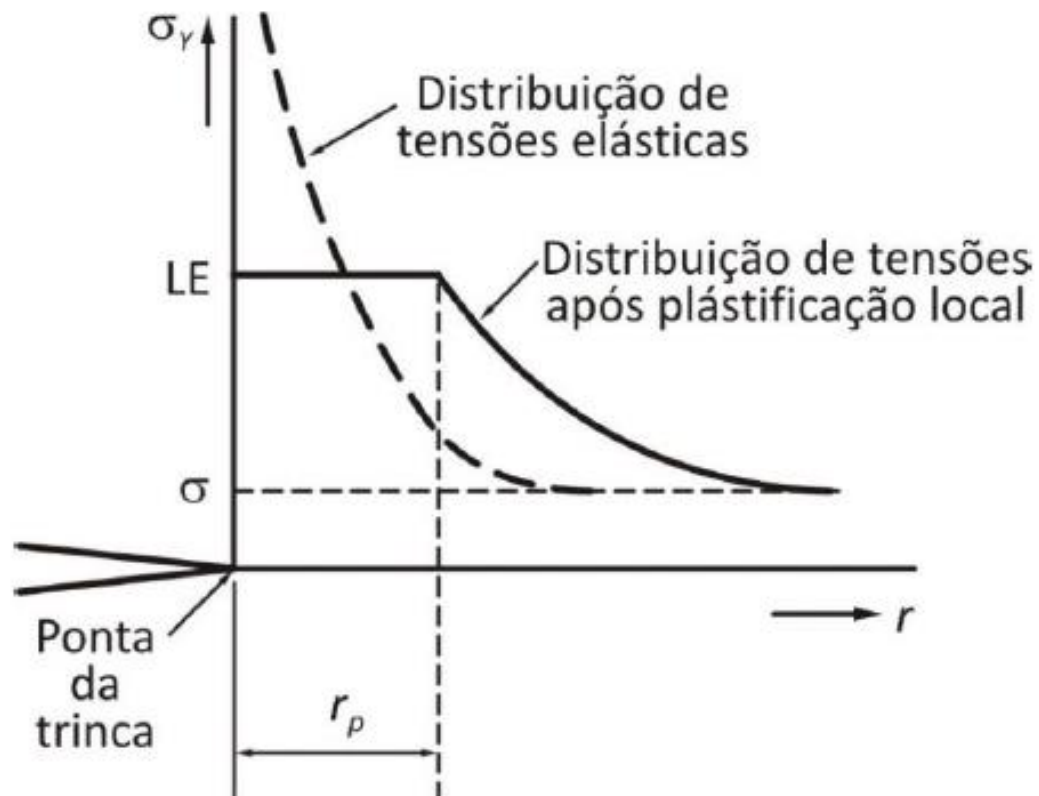
Considere o componente de tensão, σ_{yy}

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos(\theta/2) [1 + \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2)]$$

Ao longo do eixo X, $\theta = 0$:

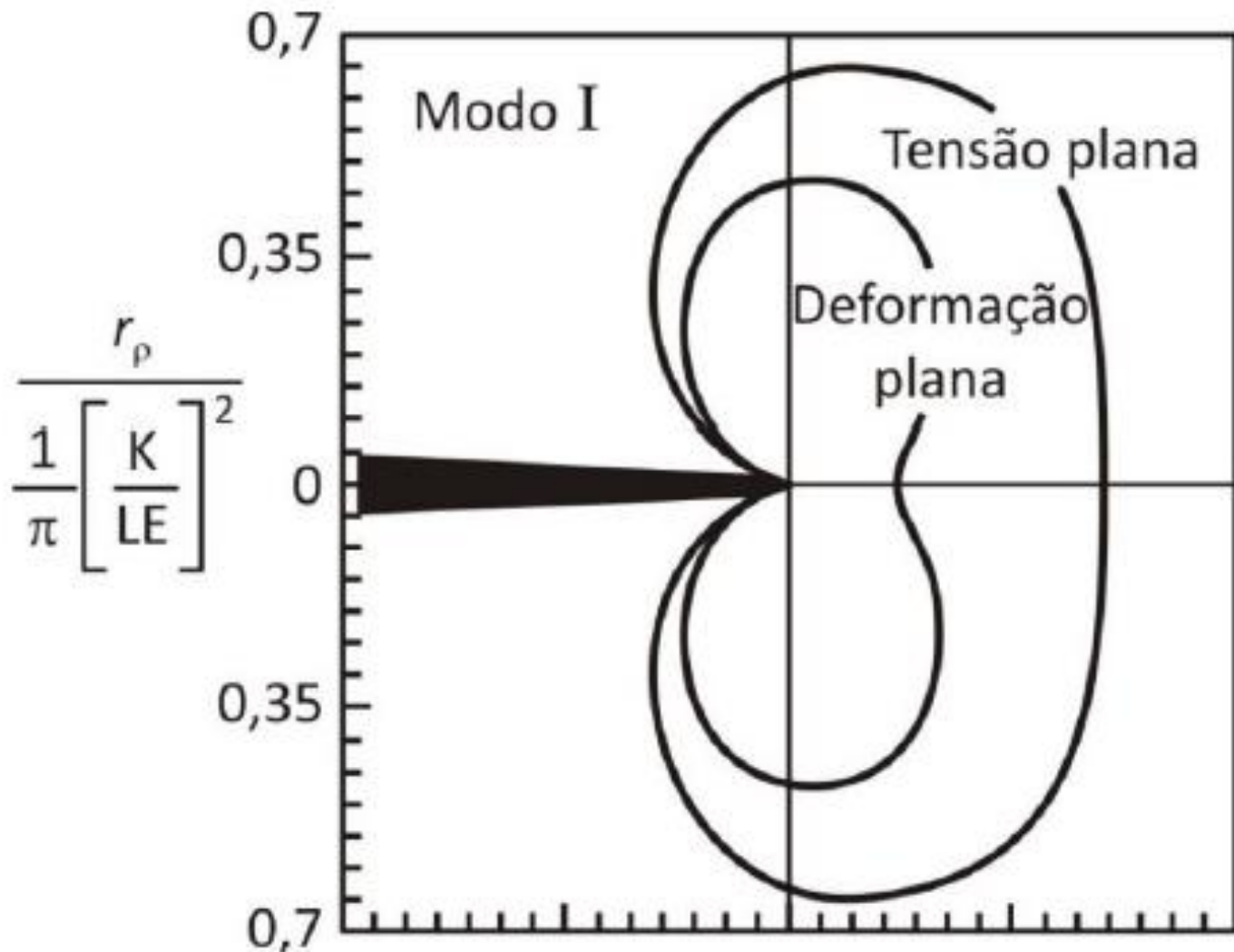
$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos(\theta/2) [1 + \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2)]$$





$$r_p = \frac{1}{\pi} \left(\frac{K}{LE} \right)^2, \text{ para estado plano de tensão.}$$

$$r_p \approx \frac{1}{6\pi} \left(\frac{K}{LE} \right)^2, \text{ para estado plano de deformação.}$$



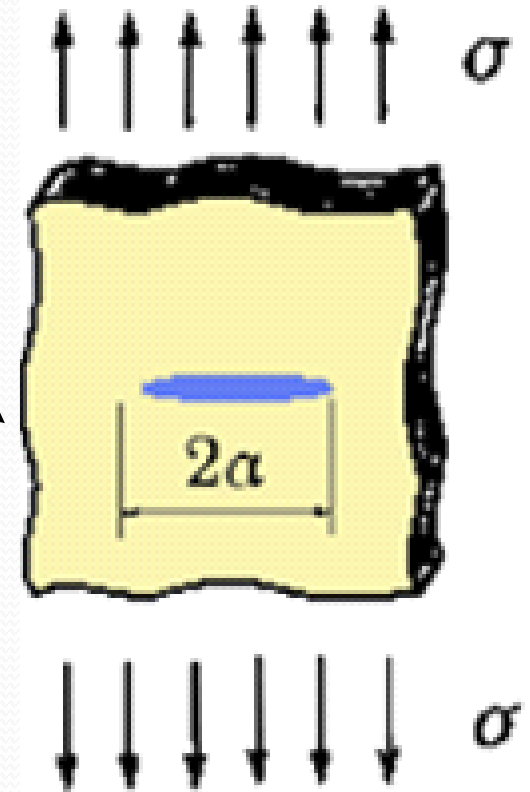
Forma da zona plástica à frente de uma trinca de modo I, estimada a partir da solução elástica empregando o critério de escoamento de von Mises

$$K_I = \lim_{r \rightarrow 0} \left\{ \sqrt{2\pi r} \sigma_{yy} \right\}$$

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a}$$

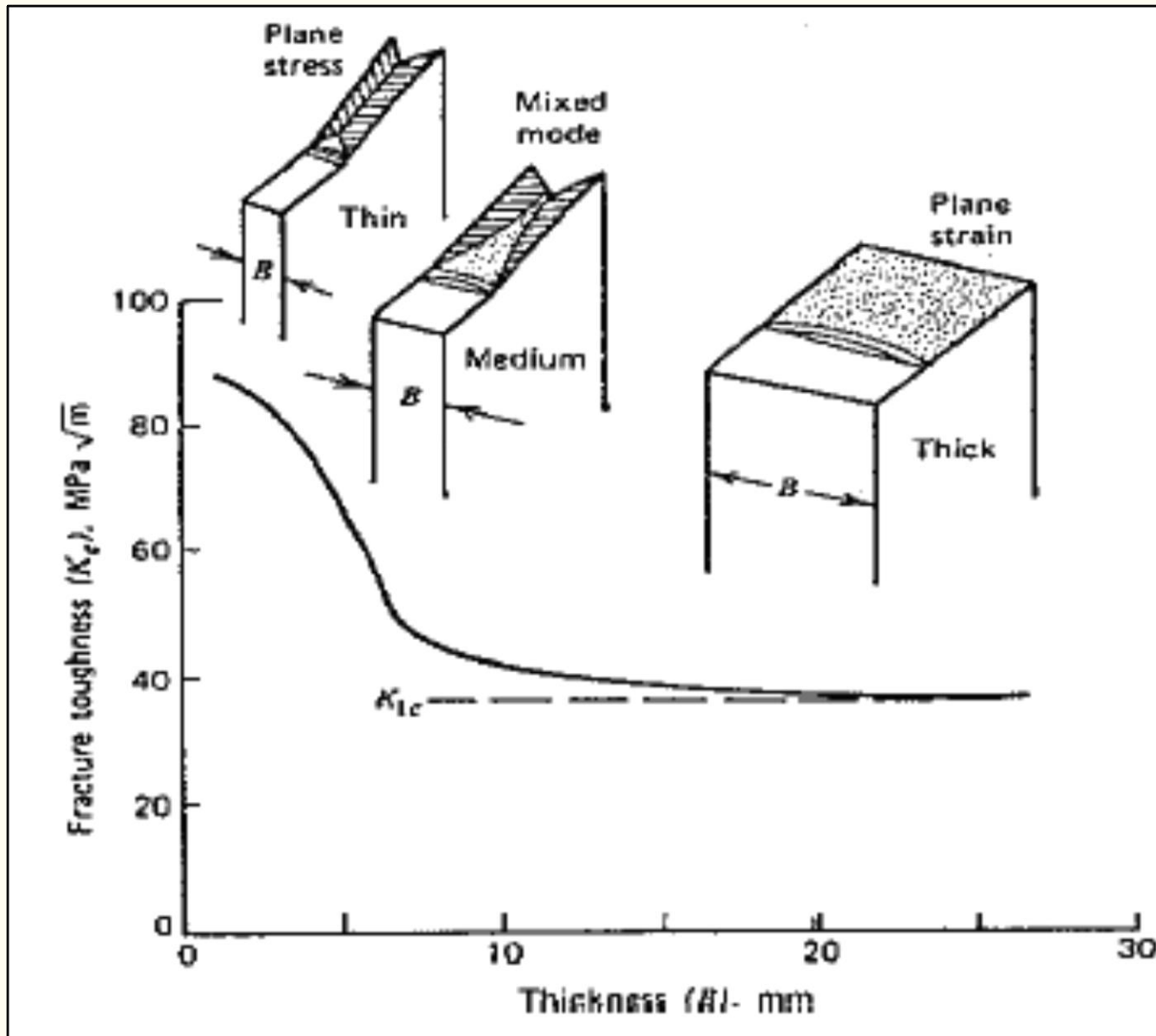
$$K_I = Y \sigma \sqrt{\pi \cdot a}$$

[MPa√m, ksi√in]

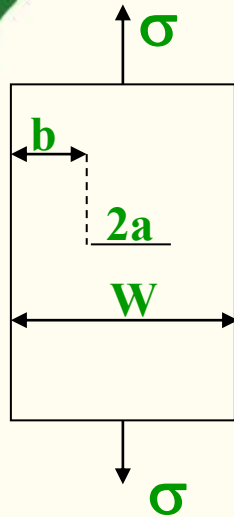


**Y = fator de correção (das geometrias do corpo e da trinca).
Soluções de K podem ser encontradas em vários livros:
Tada, Paris e Irwin(1973); Rooke e Cartwright (1975); Sih (1973),
entre outros**

Estado Plano de Tensão X Estado Plano de Deformação



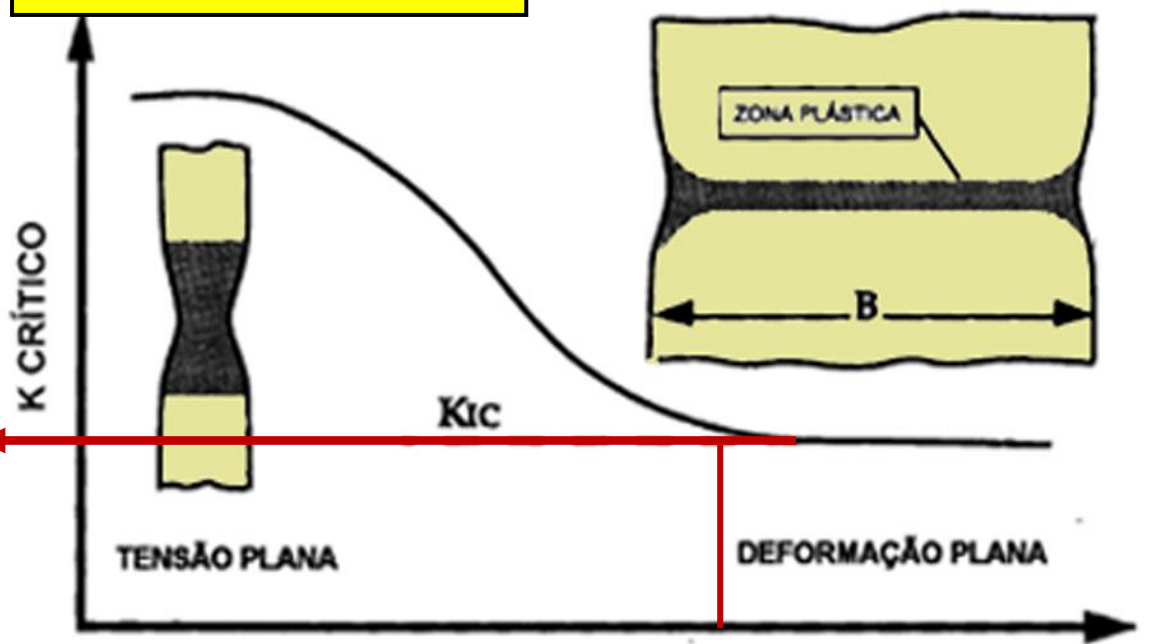
CRITÉRIO DE FRATURA



$$K = Y\sigma\sqrt{\pi a}$$

$K = K_C \rightarrow$ fratura instável

Tenacidade à Fratura.

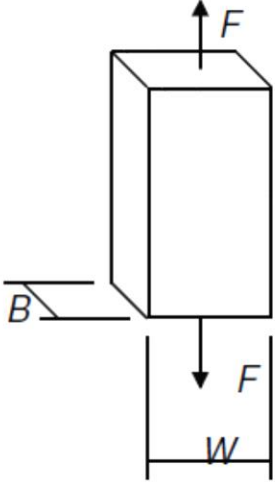
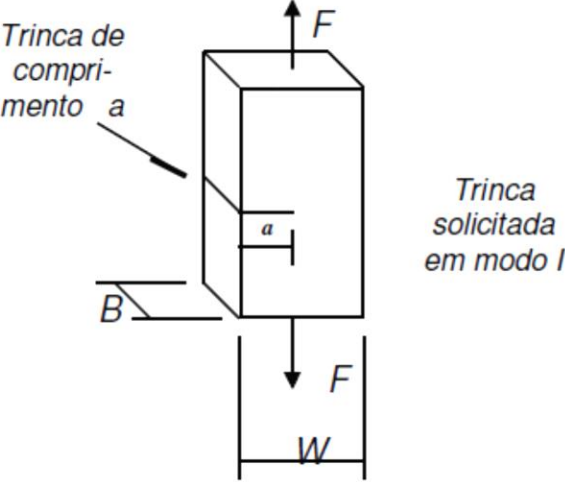


$$B \geq 2,5 \left(\frac{K_{IC}}{\sigma_e} \right)^2$$

Para que K_C seja considerado K_{IC} , a Norma ASTM E399 – Método Normalizado de Ensaio de Tenacidade à Fratura no Estado de Def. Plana de Materiais Metálicos.

$$a, B, b \geq 2,5 \left(\frac{K_I}{\sigma_e} \right)^2$$

**Hipóteses:
contínuo,
isotrópico e
homogêneo**

RESISTÊNCIA DOS MATERIAIS	MECÂNICA DA FRATURA
<p>1. Barra prismática solicitada à tração de um material de alta resistência mecânica.</p> 	<p>1. Barra com uma trinca solicitada à tração de um material de alta resistência mecânica.</p> 
<p>2. Parâmetro característico</p> $\sigma = \frac{F}{BW} \quad \text{onde:}$ <p>σ é a tensão normal de tração (MPa)</p>	<p>2. Parâmetros característicos</p> $\sigma = \frac{F}{BW}$ $K_I = y \cdot \sigma \sqrt{a} \quad \text{onde:}$ <p>y é um parâmetro adimensional que depende da geometria da trinca e do corpo [$y=f(a/W)$];</p> <p>K_I é o fator de intensidade de tensão em modo I (MPa$\cdot\sqrt{m}$);</p> <p>a é o comprimento da trinca.</p>

3. Critério de Projeto

$$\sigma_{adm} = \frac{\sigma_e}{CS} \quad \text{onde:}$$

σ_{adm} é a tensão admissível;

σ_e é o limite de escoamento;

CS é o coeficiente de segurança.

3. Critério de Projeto

$$K_{ladm} = \frac{K_{IC}}{CS'} \quad \text{onde:}$$

K_{ladm} é o fator de intensidade de tensão admissível;

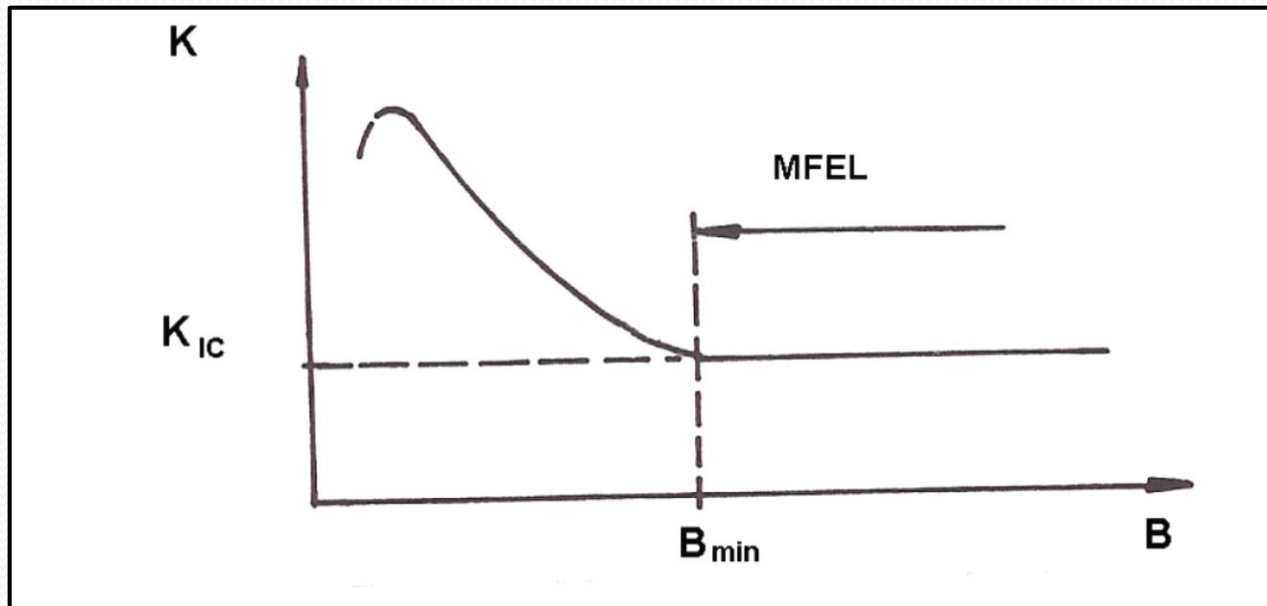
K_{IC} é a tenacidade à fratura em deformação plana (valor crítico do fator de intensidade de tensão);

CS' é o coeficiente de segurança.

A tenacidade à fratura em deformação plana (K_{IC})

$$B \geq 2,5 \left(\frac{K_{IC}}{\sigma_e} \right)^2$$

mecânica de fratura elástica linear



**MATERIAIS MUITO
DÚTEIS E/OU MUITO
TENAZES**



B – MUITO GRANDE



**ENSAIO FICA
INVIÁVEL**

**LIMITAÇÕES DA MECÂNICA
DE FRATURA LINEAR
ELÁSTICA (K_{Ic})**

**MATERIAIS MUITO
DÚTEIS E/OU MUITO
TENAZES**

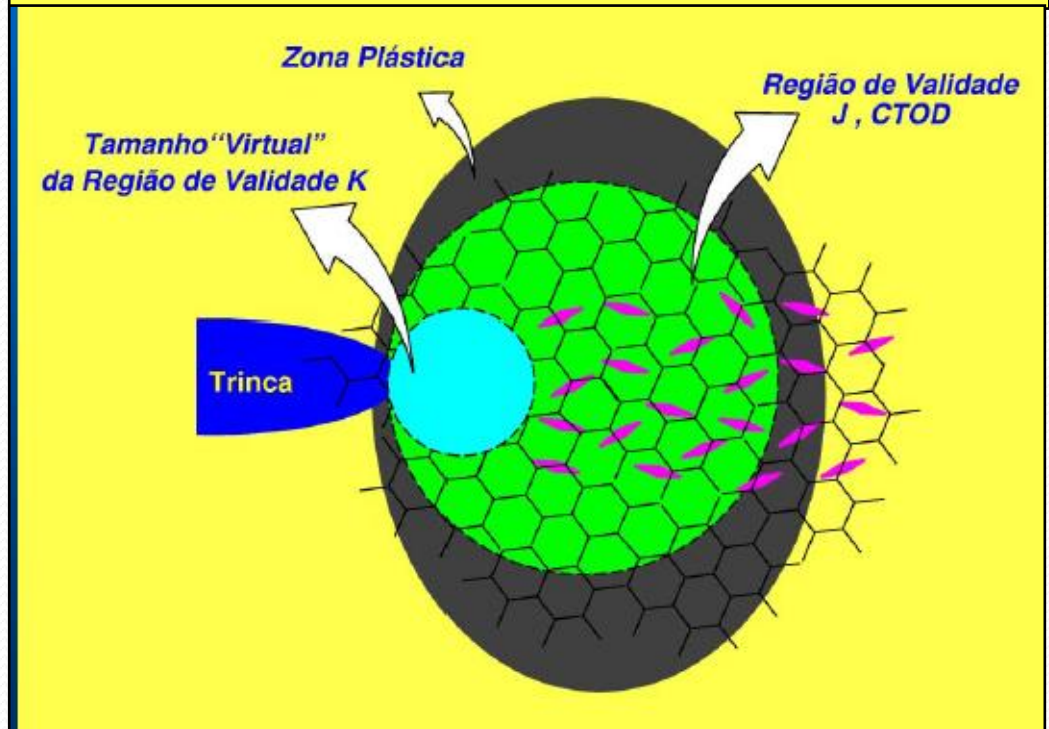
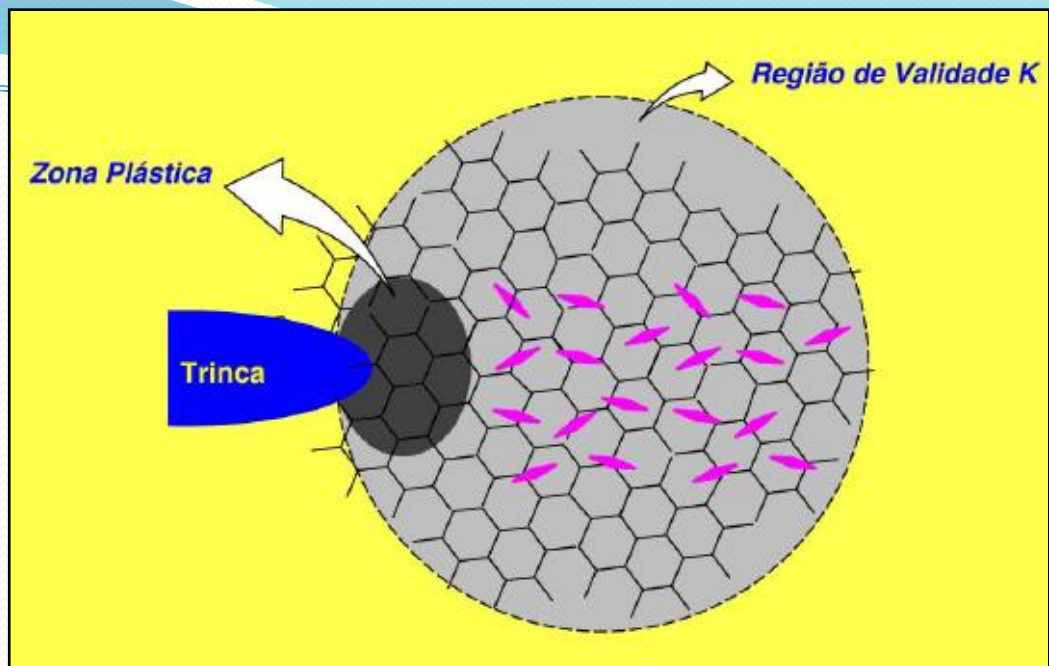
B – MUITO GRANDE

**MICROESTRUTURA
COMPLEXA DO
MATERIAL**

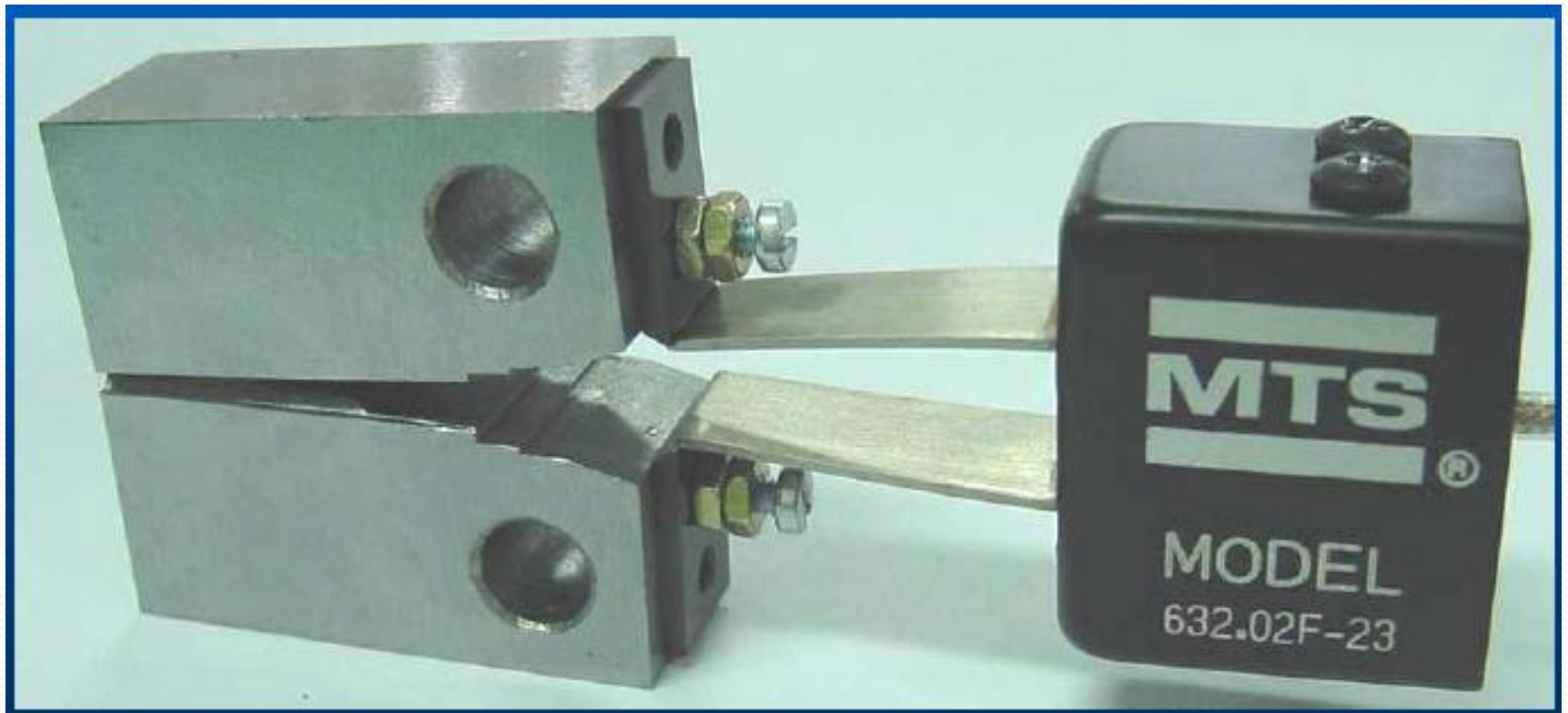


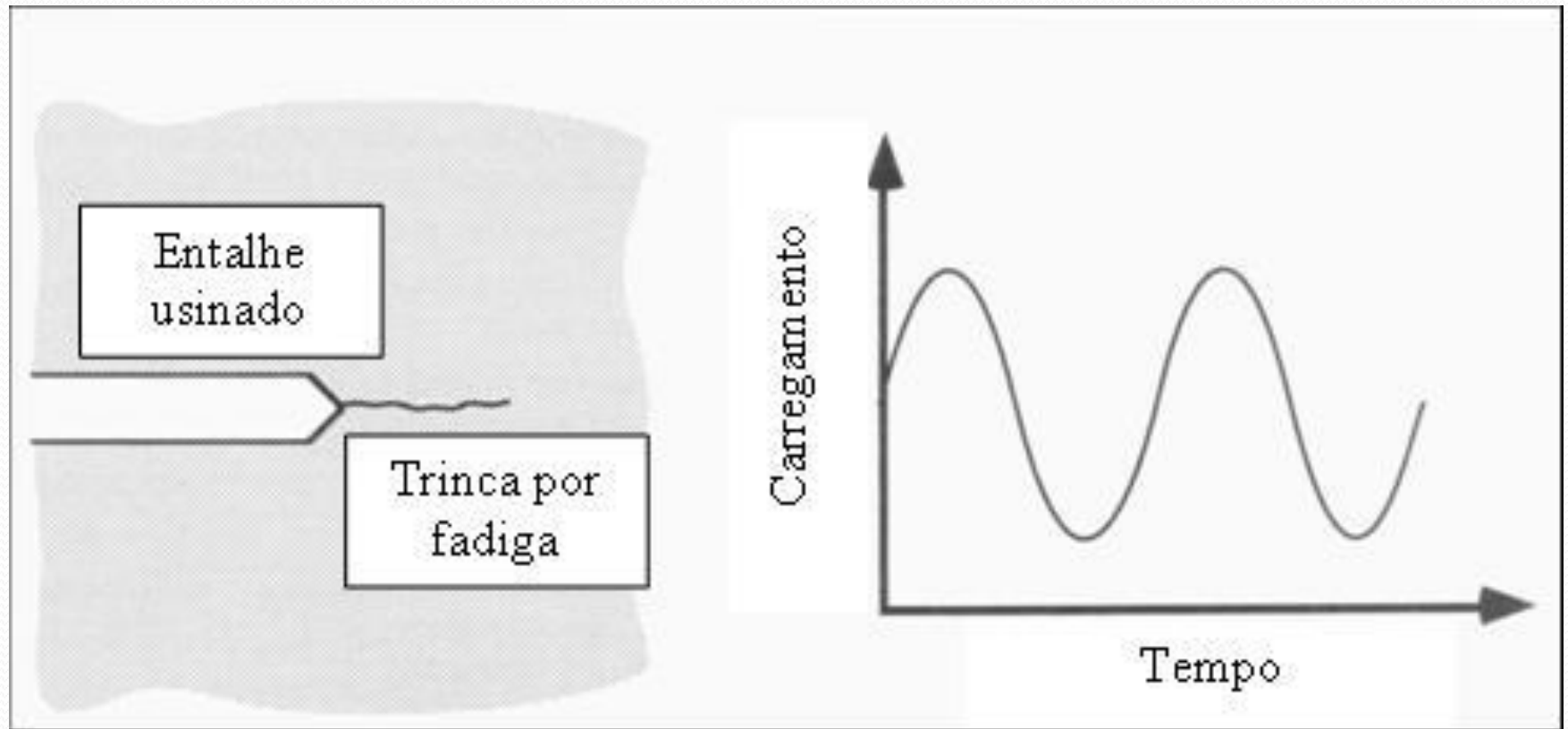
**MECÂNICA DE
FRATURA
ELASTOPLÁSTICA
(INTEGRAL J)**

MECÂNICA DE FRATURA ELASTOPLÁSTICA FUNCIONA MELHOR NOS CASOS EM QUE A ZONA PLÁSTICA É MAIOR, ISTO É, MATERIAIS MAIS DÚTEIS.



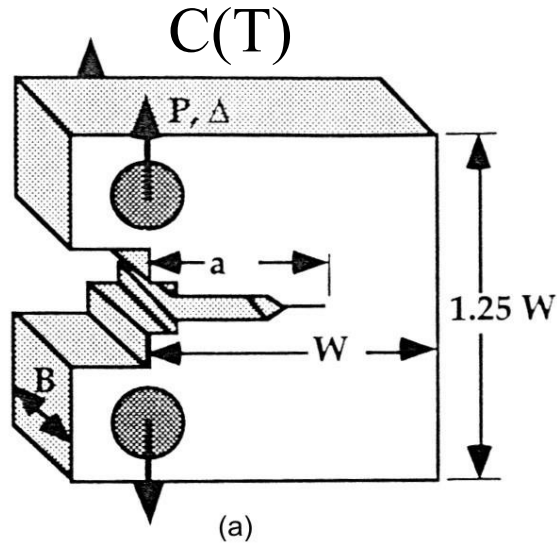
CTOD - MFEP



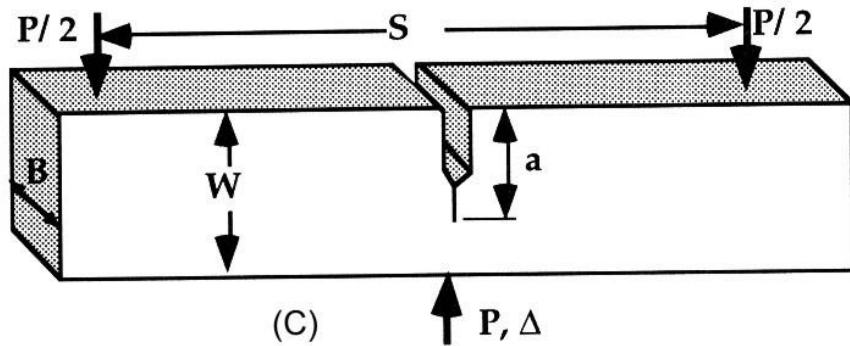


Uma trinca por fadiga é introduzida na ponta do entalhe usinado por meios de carregamento cíclico.

$$K_{IC} = \sigma Y \sqrt{\pi a}$$

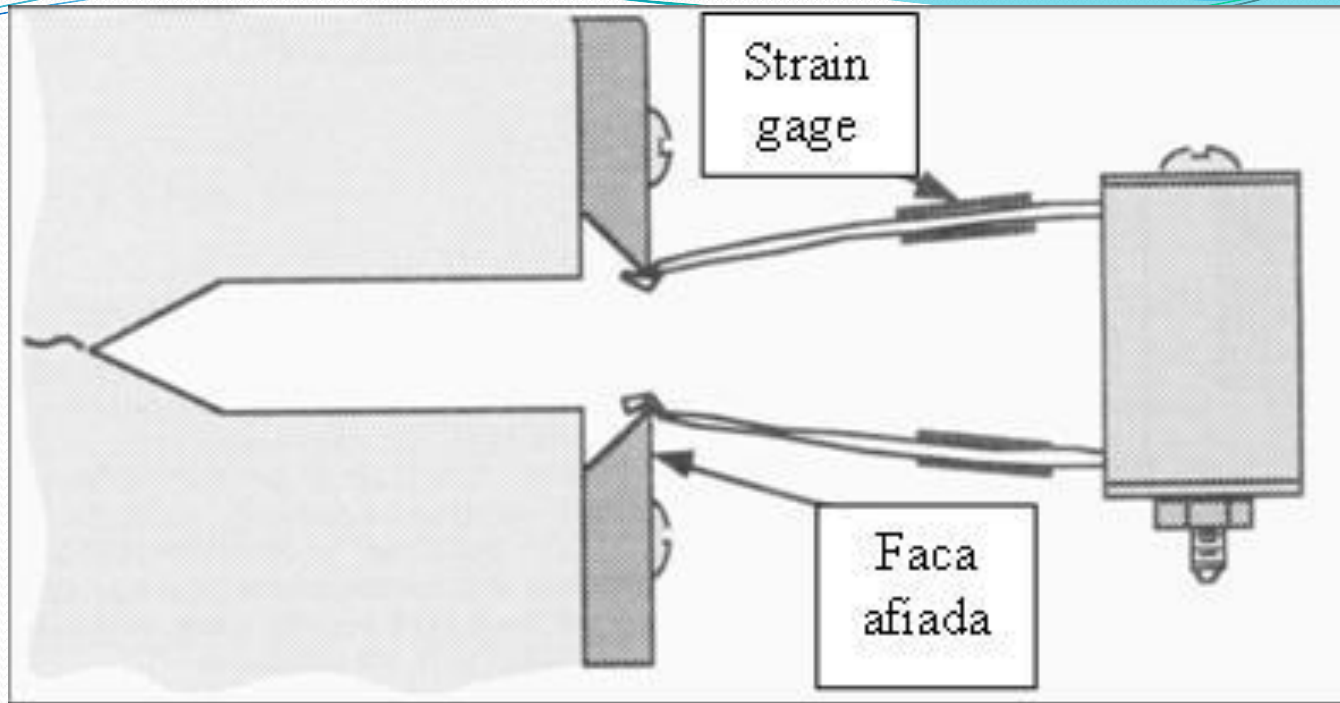


$$Y = f\left(\frac{a}{W}\right) = \frac{2 + \frac{a}{W}}{\left(1 - \frac{a}{W}\right)^{\frac{3}{2}}} \left[0,886 + 4,64\left(\frac{a}{W}\right) - 13,32\left(\frac{a}{W}\right)^2 + 14,72\left(\frac{a}{W}\right)^3 - 5,6\left(\frac{a}{W}\right)^4 \right]$$



SEN(B)

$$Y = f\left(\frac{a}{W}\right) = \frac{3 \frac{S}{W} \sqrt{\frac{a}{W}}}{2 \left(1 + 2 \frac{a}{W}\right) \left(1 - \frac{a}{W}\right)^{\frac{3}{2}}} \left[1,99 - \frac{a}{W} \left(1 - \frac{a}{W}\right) \left\{ 2,15 - 3,93 \left(\frac{a}{W}\right) + 2,7 \left(\frac{a}{W}\right)^2 \right\} \right]$$

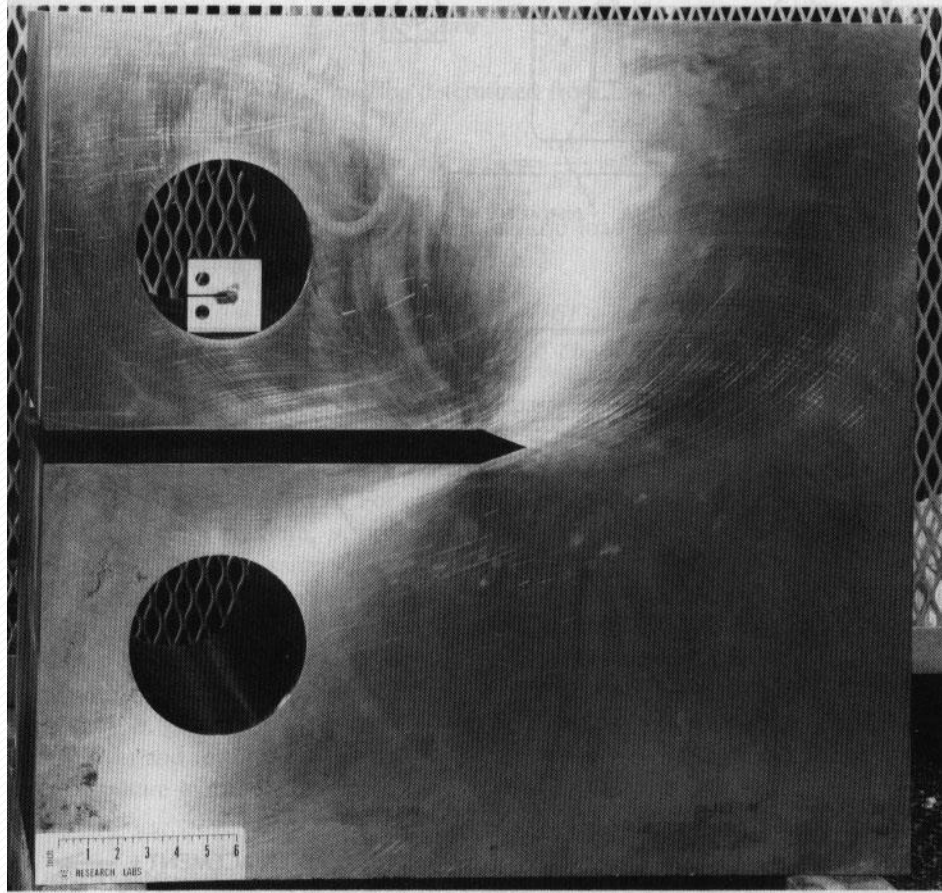


Medida do deslocamento da abertura da trinca : “clip gage”.
Medida do carregamento: células de carga da própria máquina.

Para satisfazer o teste:

Condição de deformação plana e o corpo de prova precisa se comportar de maneira linearmente elástica.

$$B, a, (W - a) \geq 2,5 \left(\frac{K_Q}{\sigma_{YS}} \right)^2$$



Definição de Fratura

“É a separação ou fragmentação de um corpo sólido em duas ou mais partes sob ação de uma tensão, devido ao início e propagação de uma trinca”

ANÁLISE DE FALHAS

RESTRITO AO LIMITE DE ESCOAMENTO

CRITÉRIOS DE ESCOAMENTO

FADIGA

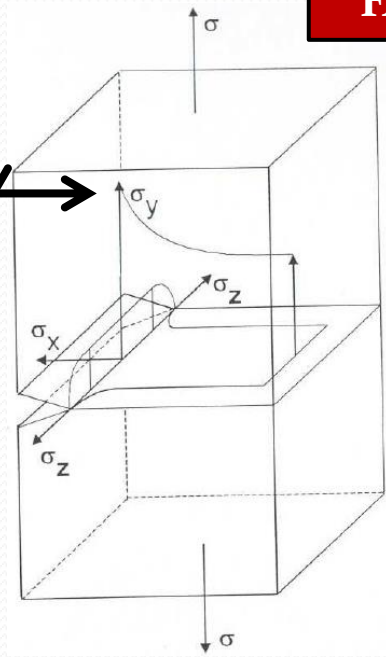
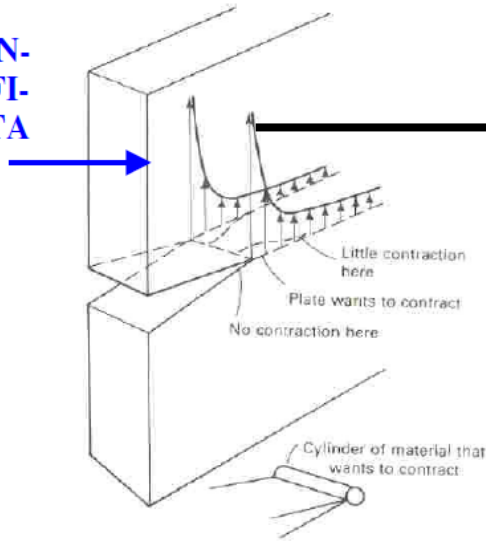
NUCLEAÇÃO DA TRINCA

PROPAGAÇÃO DA TRINCA

DEFORMAÇÃO PLANA

ESTADO TRIAXIAL DE TENSÕES

TENSÃO TENDENDO AO INFINITO NA PONTA DA TRINCA.



MECÂNICA DE FRATURA LINEAR ELÁSTICA

MECÂNICA DE FRATURA ELASTOPLÁSTICA

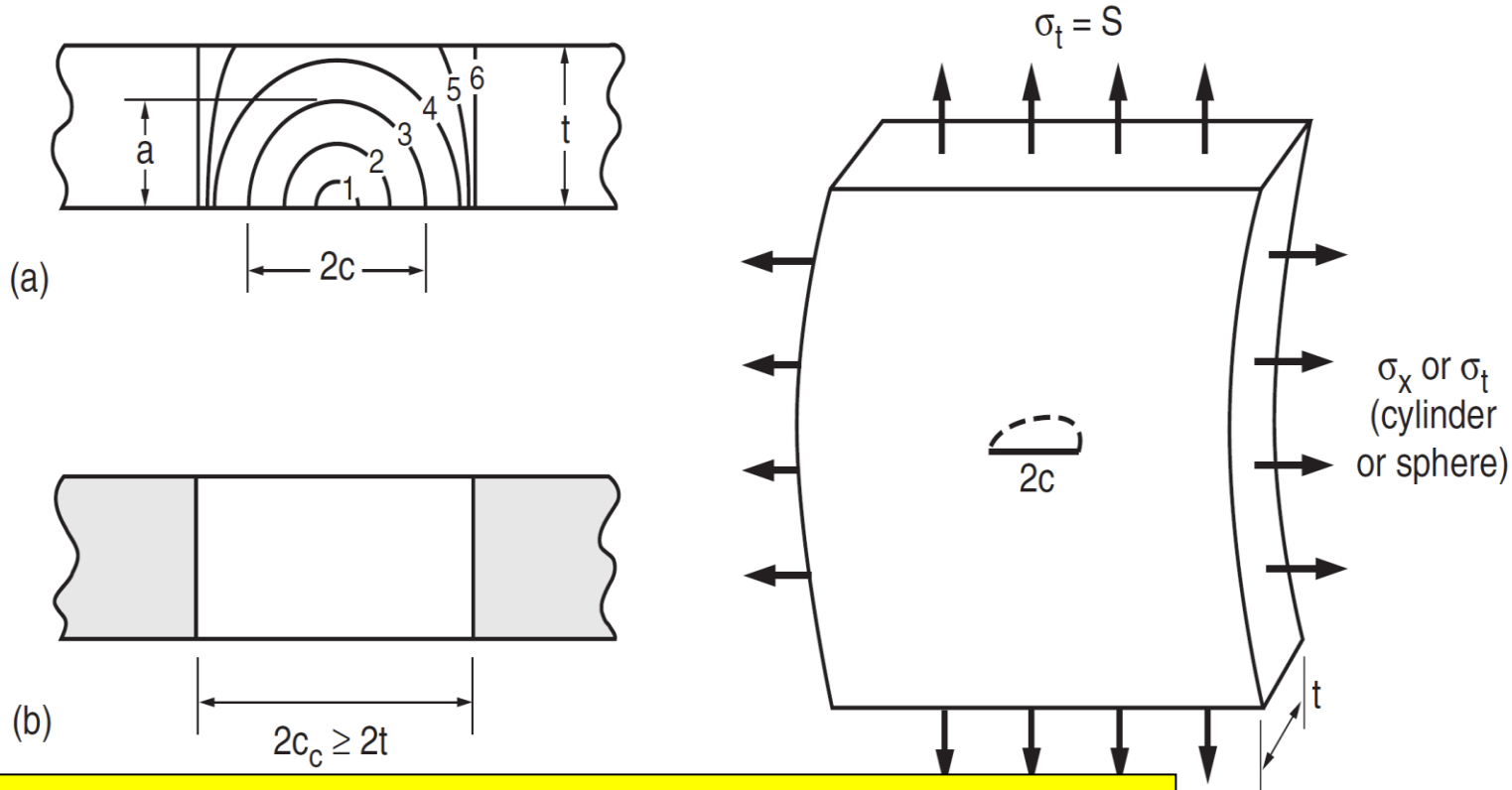
$$a_c = \frac{2 \cdot E \cdot \gamma}{\pi \cdot \sigma^2 (1 - \nu^2)}$$

FRATURA FINAL

COMPRIMENTO CRÍTICO DE TRINCA

$$B \geq 2,5 \left(\frac{K_{IC}}{\sigma_e} \right)^2$$

Conceito Leak-Before-Break



Para evitar fratura catastrófica: $a_c = C_c \geq t$

Figure 8.26 A crack in the wall of a pressure vessel, showing (a) its growth from a small surface flaw and (b) the minimum critical size of a through-wall crack to provide leak-before-break.

$$c_c = \frac{1}{\pi} \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_t} \right)^2$$

Fratura

Dútil

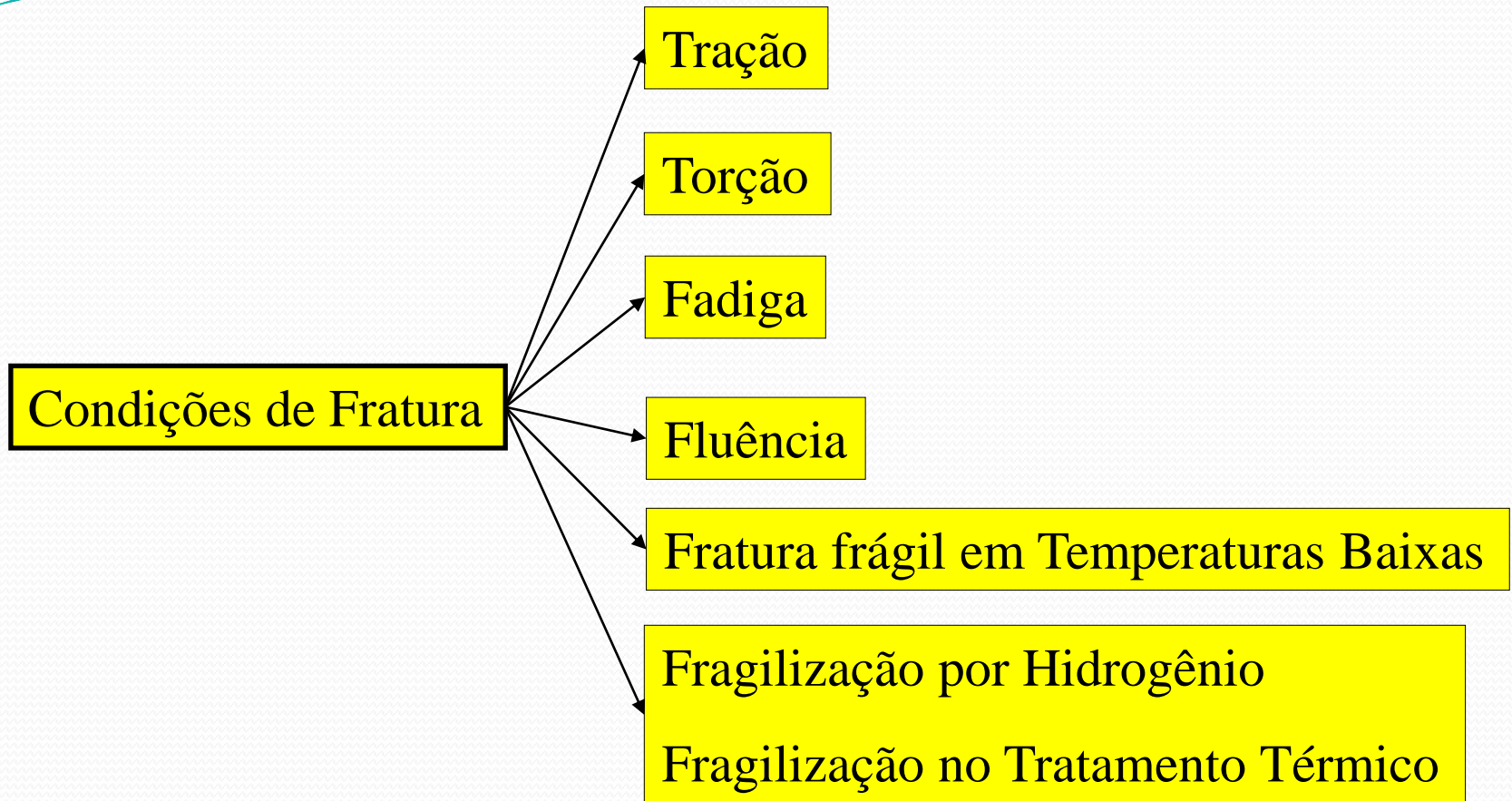
Frágil

Fatores que afetam a fratura

Temperatura

Taxa de deformação

Estado de tensão
-plano de tensões (triaxial de def.)
-triaxial de tensões (plano de def.)



Relações Entre Microestrutura e K_{IC}

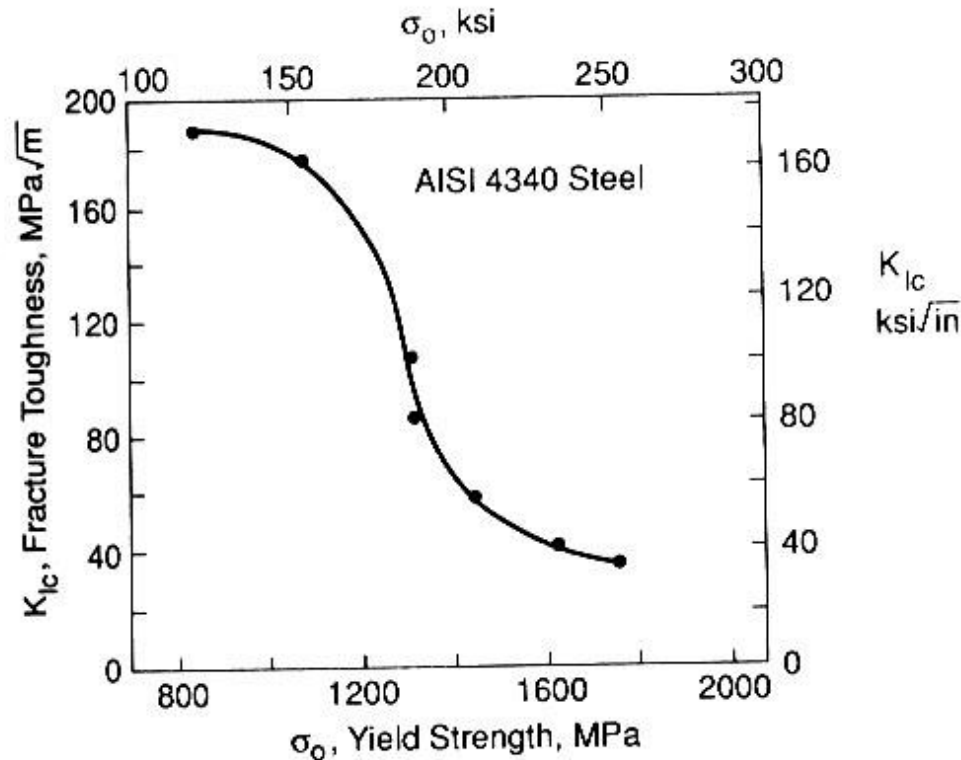
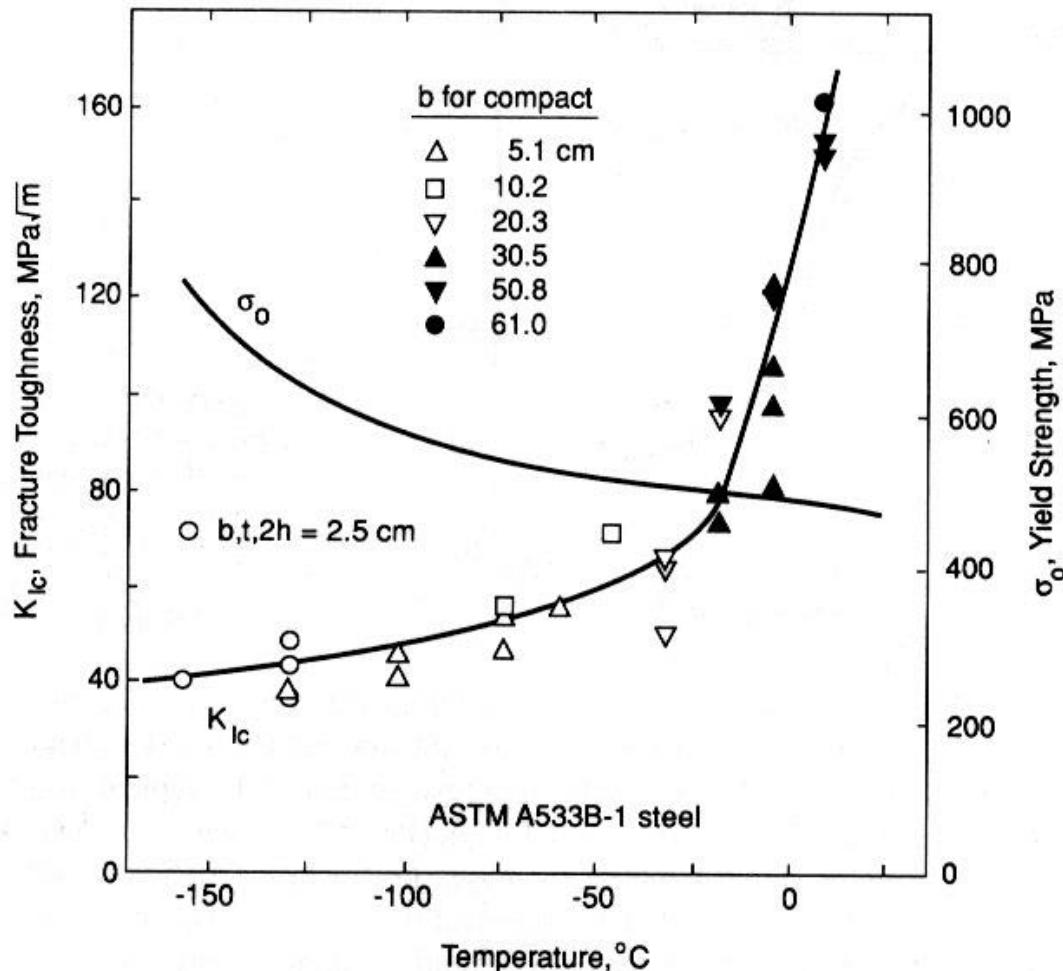


Figure 8.27 Fracture toughness vs. yield strength for AISI 4340 steel quenched and tempered to various strength levels. (Adapted from an illustration courtesy of W. G. Clark, Jr., Westinghouse Science and Technology Ctr., Pittsburgh, Pa.)

O aumento do limite de escoamento leva ao decréscimo da tenacidade à fratura. Esse aumento do LE indica alteração microestrutural.

Efeito da Temperatura



**ASTM A 533-B- CL.1
Pressure Vessel Plates,
Alloy Steel, Quenched
and Tempered,
Manganese-
Molybdenum and
Manganese-
Molybdenum-Nickel**

Figure 8.28 Fracture toughness and yield strength vs. temperature for a nuclear pressure vessel steel. Compact specimens and one nonstandard geometry were used in sizes indicated. (Adapted from [Clark 70]; copyright ©ASTM; reprinted with permission.)



A 533/A 533M – 93 (2004)^{ε1}

TABLE 1 Chemical Requirements

	Composition, %			
	Type A	Type B	Type C	Type D
Carbon, max ^A	0.25	0.25	0.25	0.25
Manganese ^B :				
Heat analysis	1.15–1.50	1.15–1.50	1.15–1.50	1.15–1.50
Product analysis	1.07–1.62	1.07–1.62	1.07–1.62	1.07–1.62
Phosphorus, max ^A	0.035	0.035	0.035	0.035
Sulfur, max ^A	0.035	0.035	0.035	0.035
Silicon:				
Heat analysis	0.15–0.40	0.15–0.40	0.15–0.40	0.15–0.40
Product analysis	0.13–0.45	0.13–0.45	0.13–0.45	0.13–0.45
Molybdenum:				
Heat analysis	0.45–0.60	0.45–0.60	0.45–0.60	0.45–0.60
Product analysis	0.41–0.64	0.41–0.64	0.41–0.64	0.41–0.64
Nickel:				
Heat analysis	...	0.40–0.70	0.70–1.00	0.20–0.40
Product analysis	...	0.37–0.73	0.67–1.03	0.17–0.43

^A Applies to both heat and product analyses.

^B The maximum manganese content may be increased to 1.60 % on heat analysis and 1.65 % on product analysis when Class 2 or Class 3 properties are specified and when Supplementary Requirement S3 (see Specification A 20/ A 20M) is specified with a total holding time of more than 1 h/in. [2.4 min/mm] of thickness.

TABLE 2 Tensile Requirements

	Class 1	Class 2	Class 3
	ksi [MPa]	ksi [MPa]	ksi [MPa]
Tensile strength	80–100 [550–690]	90–115 [620–795]	100–125 [690–860]
Yield strength, min	50 [345]	70 [485]	83 [570]
Elongation in 2 in. [50 mm], min, % ^A	18	16	16

^ASee Specification A 20/A 20M for elongation adjustment.

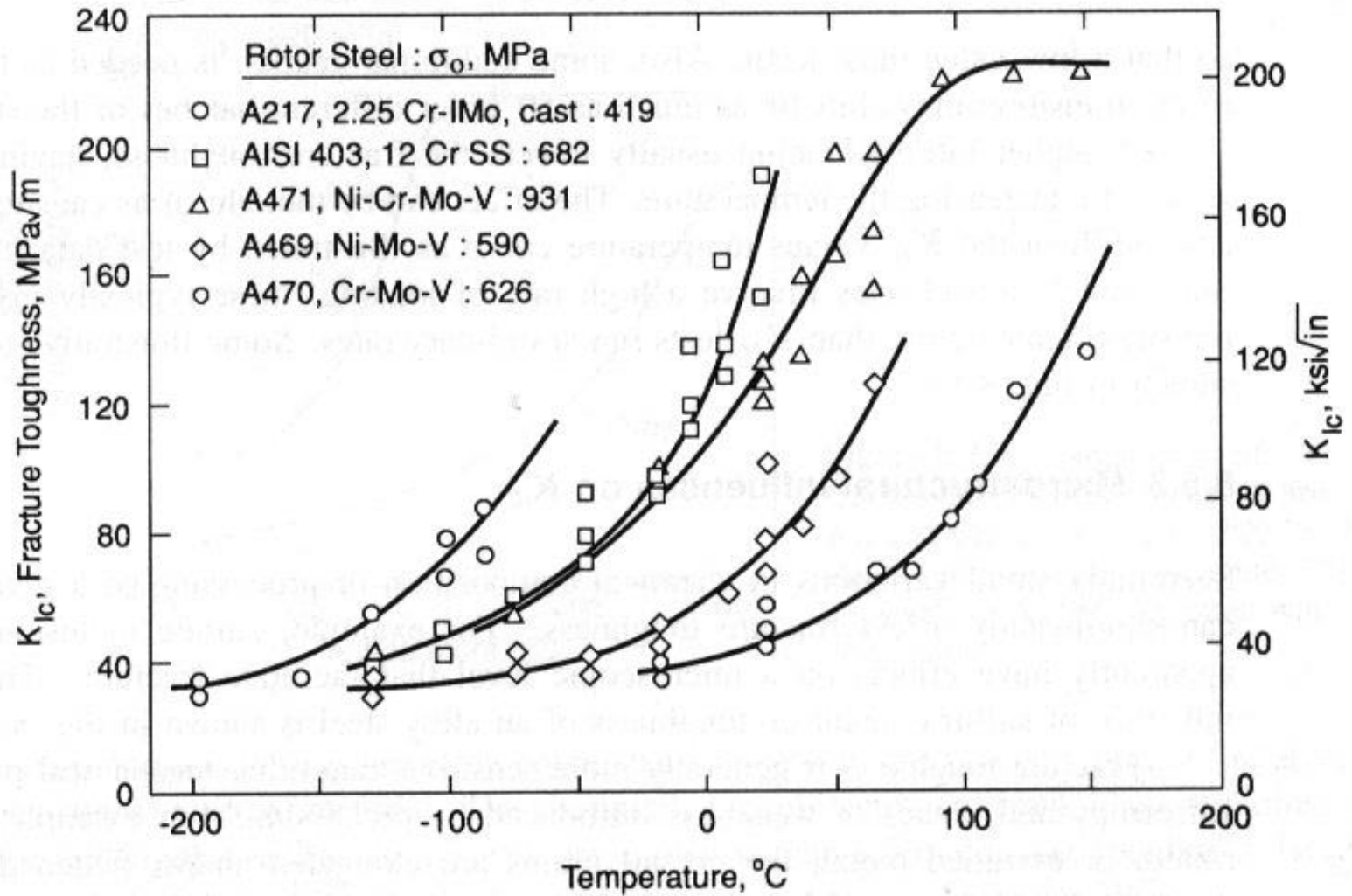


Figure 8.30 Fracture toughness vs. temperature for several steels used for turbine-generator rotors. (Data from [Logsdon 76].)

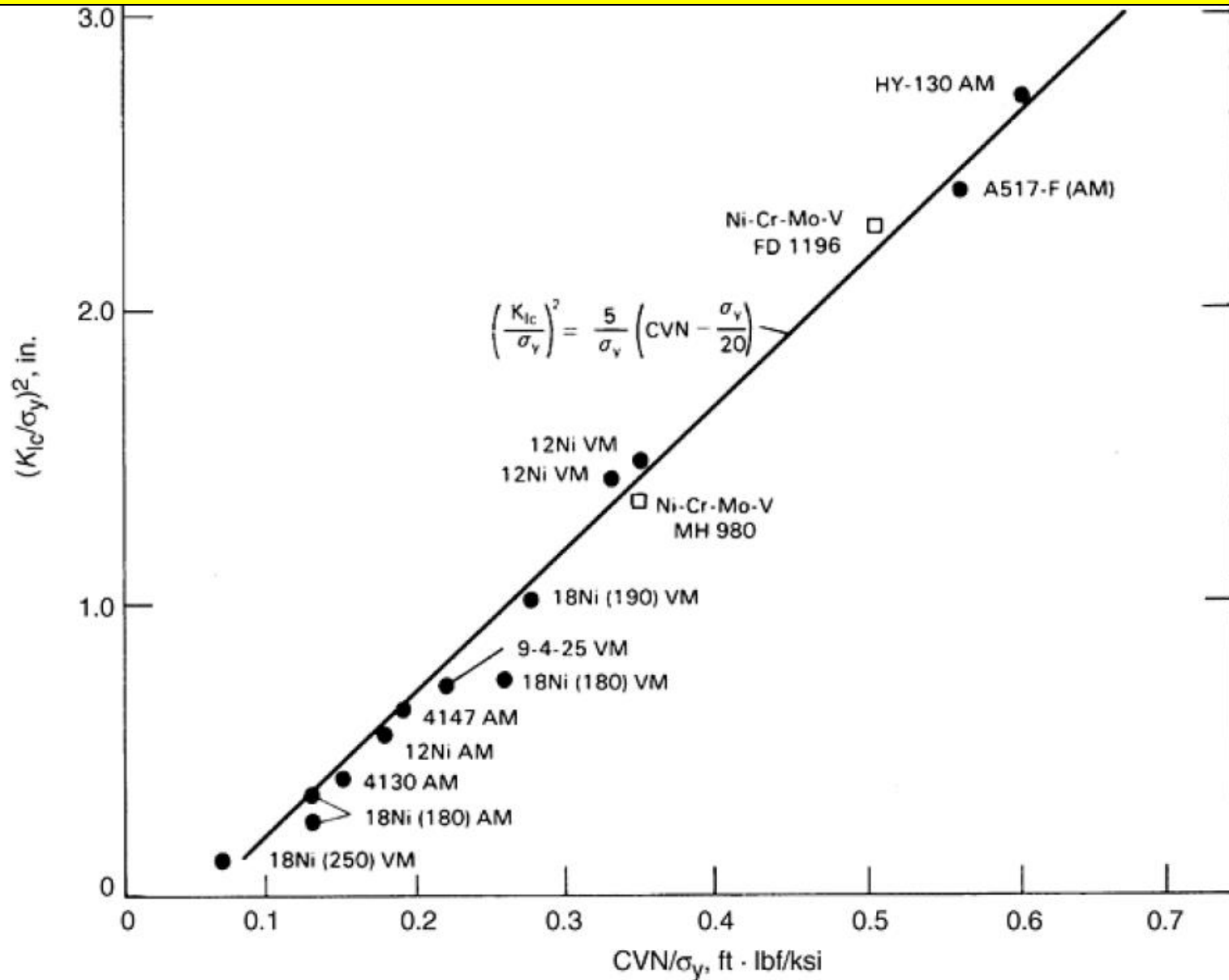


Fig. 9 Relation between plane-strain fracture toughness (K_{Ic}) and Charpy V-notch (CVN) impact energy. Tests conducted at 27 °C (80 °F). VM, vacuum melted; AM, air melted 41

FRATURA É UM TIPO DE
FALHA

PODE SER ESTUDADA
EM VÁRIAS **ESCALAS**

ANÁLISE DE FALHAS

ESCALAS DE FRATURA

**NANOESTRUTURAS:
GRAFENO, FULERENO
BUCKMINSTER**

**MICRODISPOSITIVOS :
CHIPS**

**PEÇAS PEQUENAS:
BIELA,
VIRABREQUIM**

**GRANDES PEÇAS: VIGA
DE PONTE ROLANTE**

**GRANDES EQUIPAMENTOS:
COMPORTAS , REATORES
QUÍMICOS E NUCLEARES**

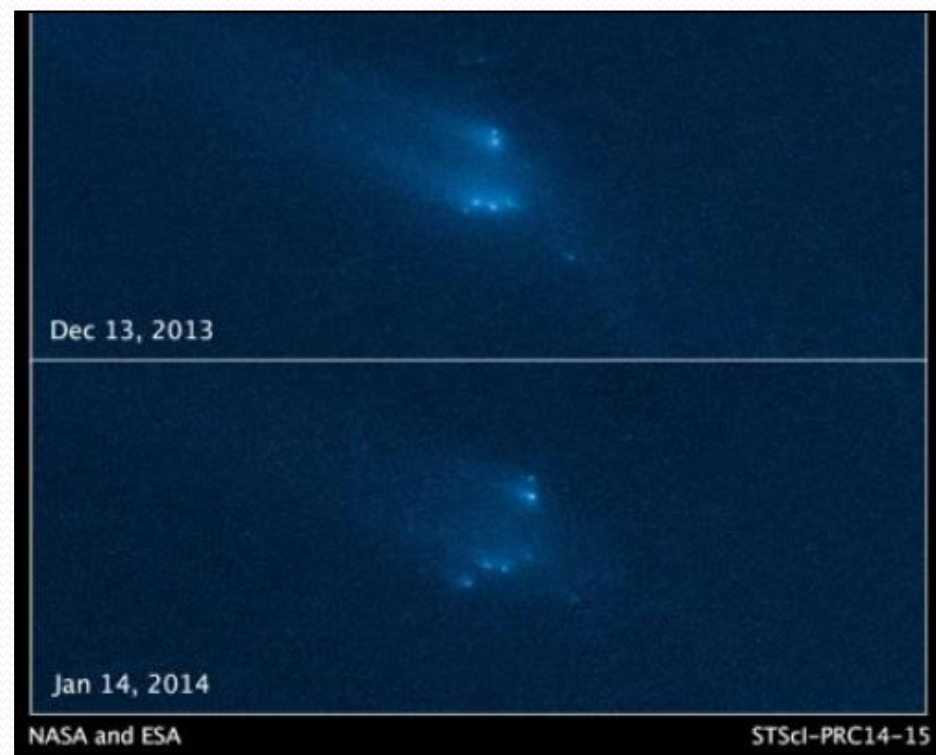
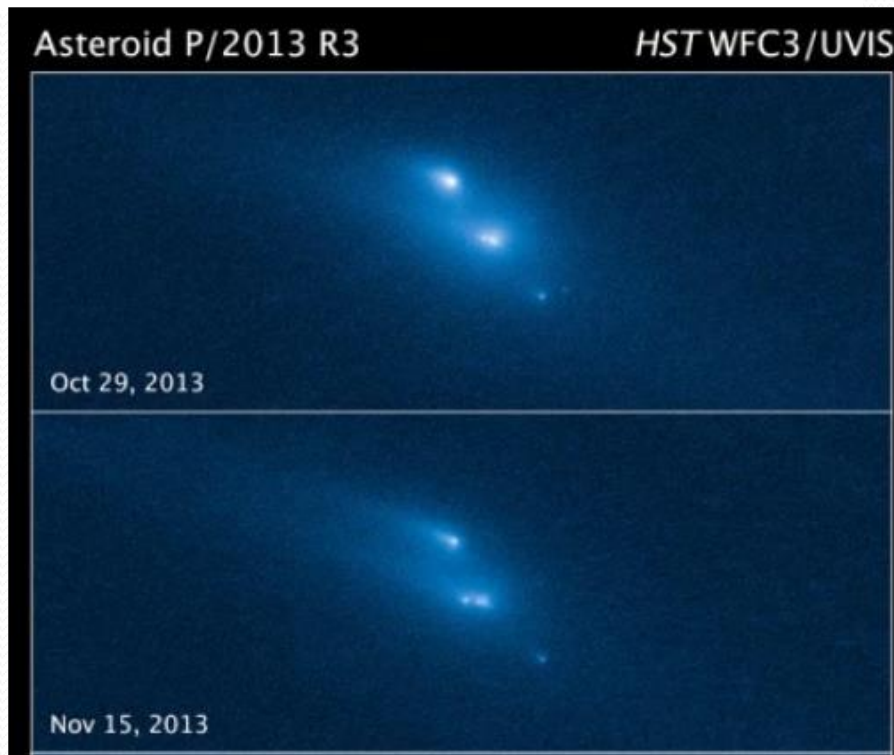
**SISTEMAS
COMPLETOS:
AUTOMÓVEL**

EDIFÍCIOS

**PLANETAS ,
METEORITOS,
COMETAS E
ASTERÓIDES**

Despedaçado pela luz!

14/03/2014, às 10:17, por Cássio Barbosa



Os 4 maiores fragmentos: 200 m de diâmetro. Velocidade de distanciamento: 2 km/h sugere que rompimento foi lento, iniciando no final de 2013 e terminando no início de 2014. Não foi explosão: a pressão da luz solar foi a causa raiz. A luz carrega momento linear: radiômetro de Crooks.

Jupiter in Ultraviolet



H N Q₂ D/G
B Q₁ R L

Hubble Space Telescope
Wide Field Planetary Camera 2

Cometa shoemaker-levy 9 - fraturou-se em 21 fragmentos devido ao campo gravitacional do planeta, em julho de 1994. O menor fragmento era do tamanho da Terra. A Energia do impacto foi similar à gigantescas bombas nucleares.

FOTO ORIGINAL DO HUBBLE ENVIADA PELO DR. PETER LEONARD.

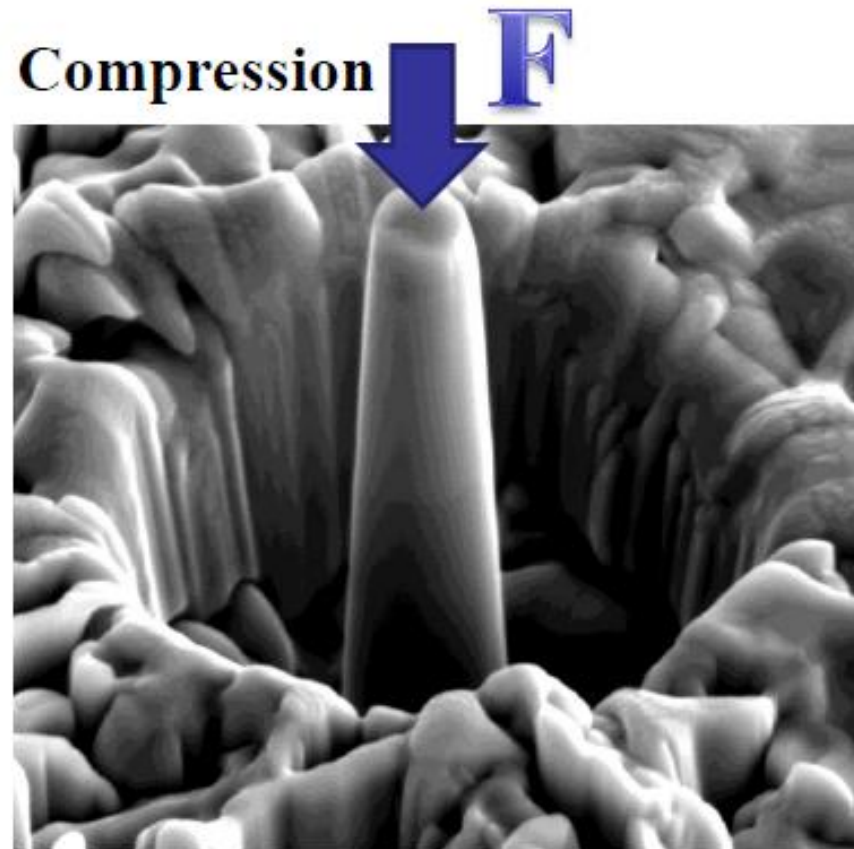
Test specimens

Fracture
mechanics



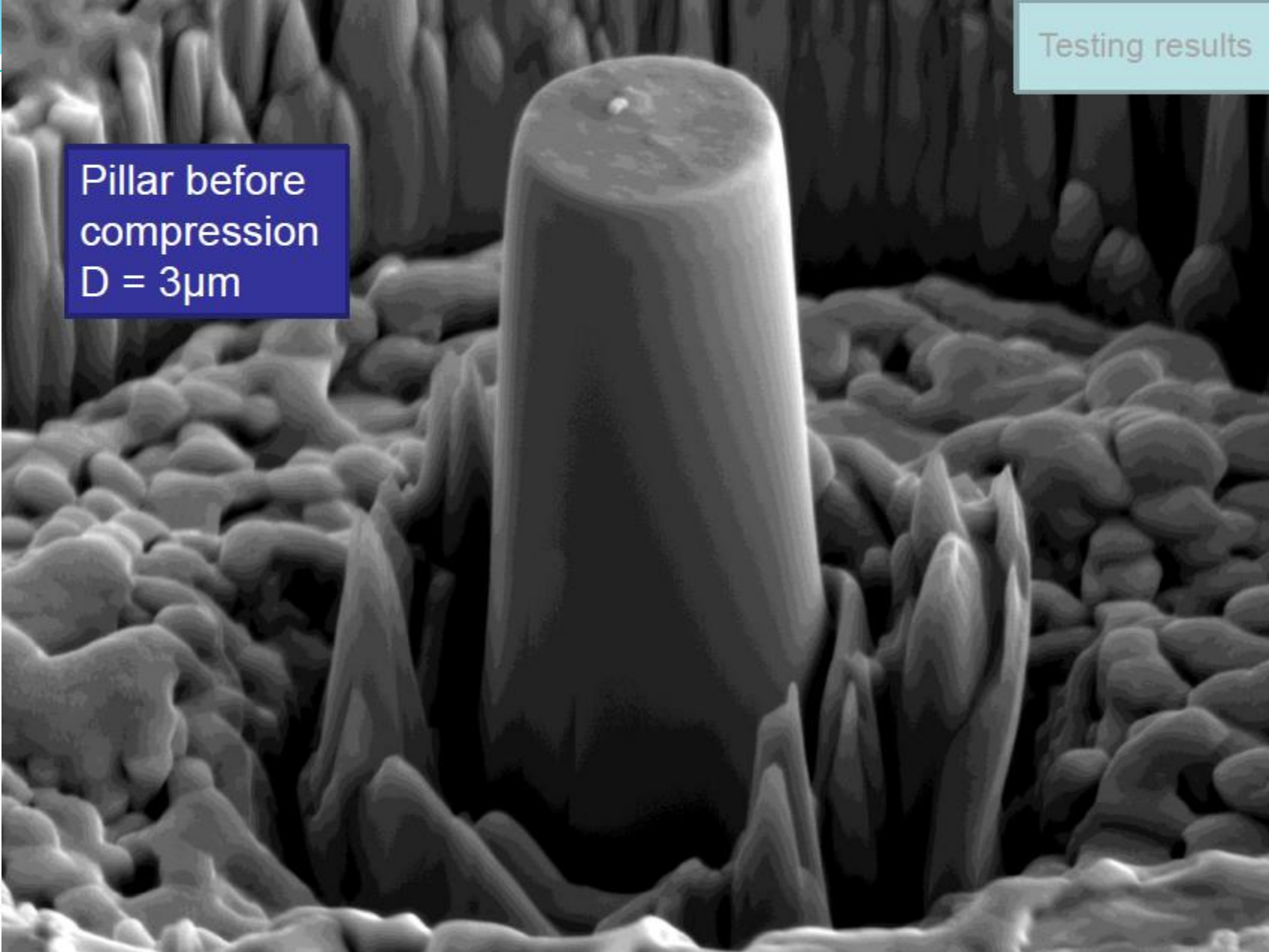
→ Fracture toughness (K_{Ic})

Compression

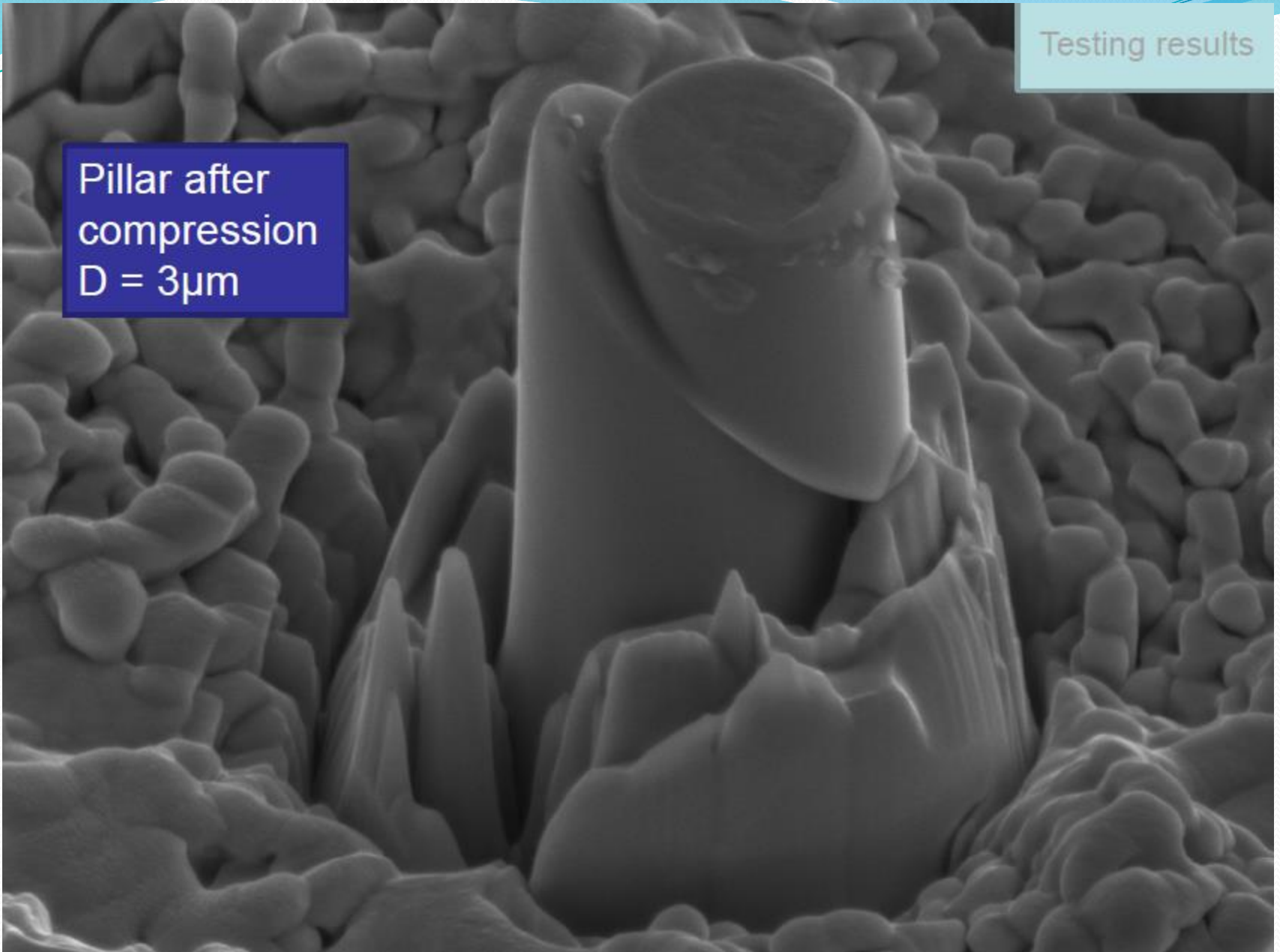


→ Yield stress (σ_y)

Pillar before
compression
 $D = 3\mu\text{m}$

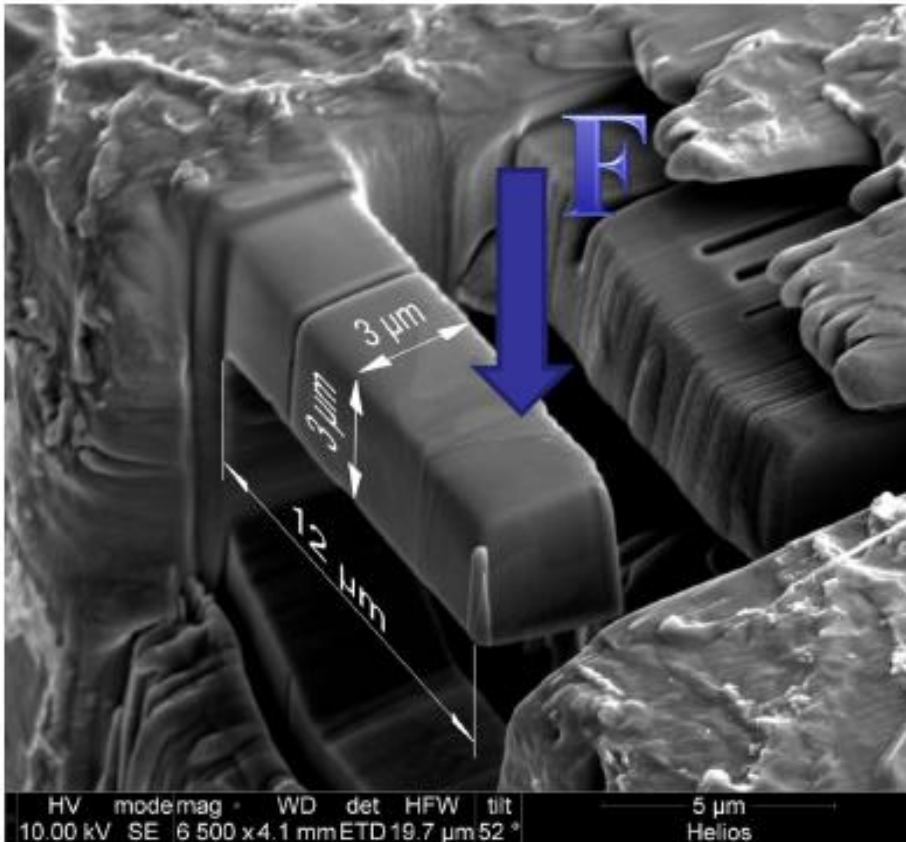


Pillar after
compression
 $D = 3\mu\text{m}$

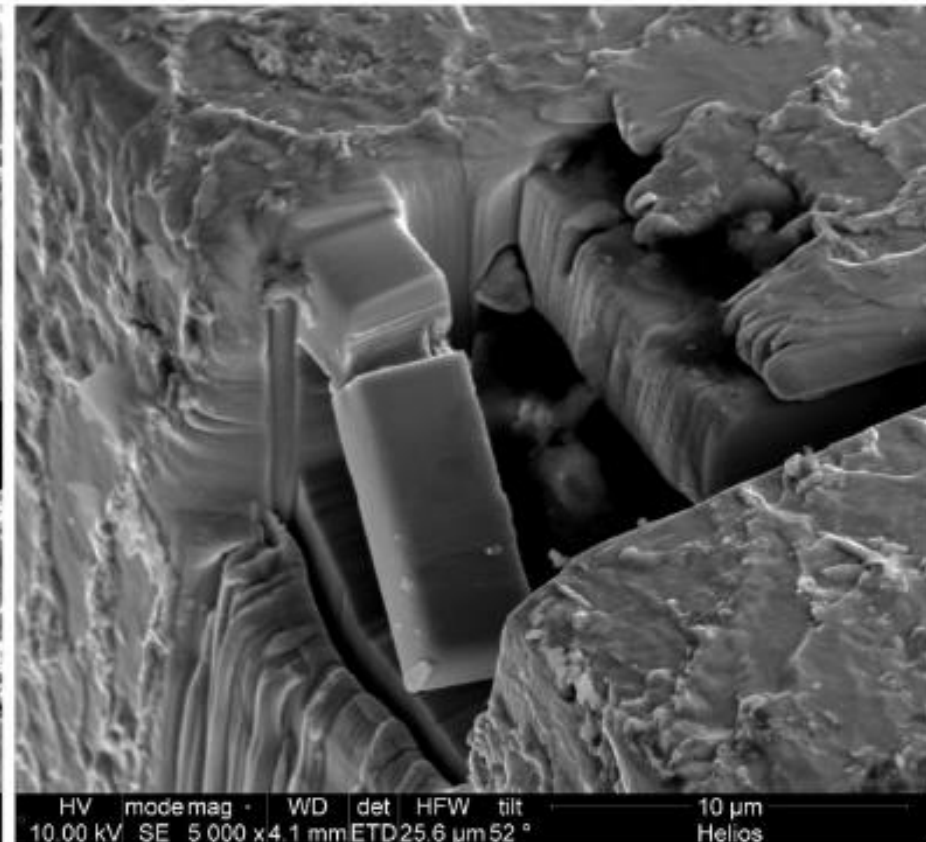


Fracture mechanics test: cantilever beam with notch

Before loading



After loading



**SUPERFÍCIE DE
FRATURA**



**MICROMECHANISMO
DE FRATURA**



GRÃOS



**NÍVEL ATÔMICO MODELOS DE ESFERAS
RÍGIDAS: MODELOS ATOMÍSTICOS-
DISCORDÂNCIAS**



**NÍVEL SUBATÔMICO: PERTURBAÇÃO DA FUNÇÃO DE
ONDA**

O estudo da fratura tornou-se tão importante que os cientistas da época achavam que seria necessário o aprofundamento das investigações nesta área, em direção ao **mecanismo de fratura em nível atômico**. A partir de uma **reunião no MIT** (Massachusetts Institute of Technology), em **1957**, de um seleto e pequeno grupo de cientistas, foi elaborado um **encontro internacional**. Assim, entre **12 e 16 de abril de 1959**, ocorreu a **Conferência Internacional sobre Mecanismos Atômicos de Fratura**, sediado em **Swampscott, Massachusetts**, na New Ocean House

M. Cohen *Massachusetts Institute of Technology*

A. H. Cottrell *University of Cambridge,
England*

N. J. Petch *University of Leeds,
England*

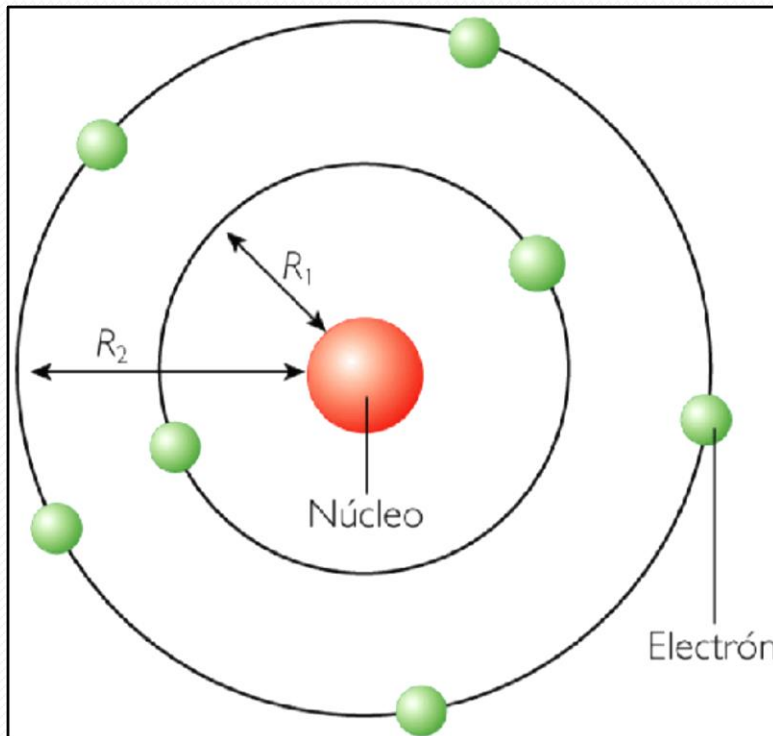
C. Zener *Westinghouse Research Laboratories,
Pittsburgh, Pennsylvania*

R. W. K. Honeycombe *University of Sheffield,
England*

G. R. Irwin *U. S. Naval Research Laboratory,
Washington, D.C.*

E. Orowan *Massachusetts Institute of Technology*

Rutherford- 1911:Órbitas – falhavam já para o átomo de Hidrogênio – desde Maxwell (1831-1879) sabia-se – partícula acelerada emite radiação e perde energia: elétron se fundiria com o núcleo



Átomo de Bohr (1913)

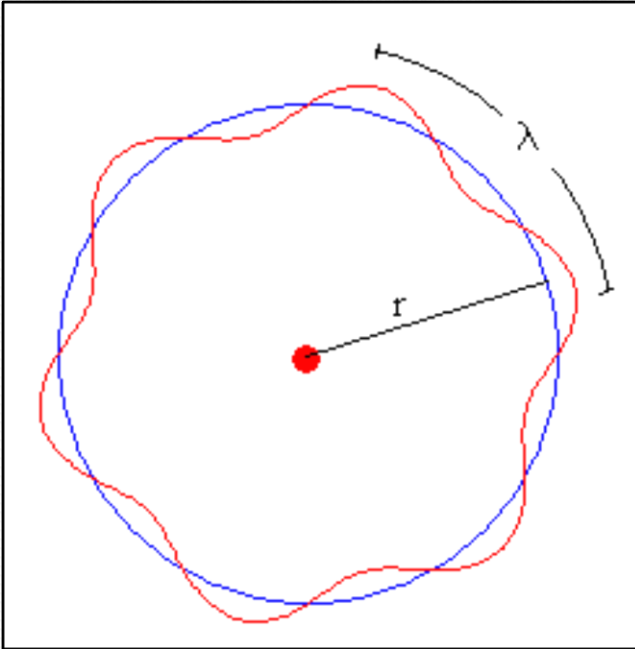
Bohr quantizou os níveis energéticos (corrigindo Rutherford-órbitas): só funcionava para o hidrogênio.

$$L = n \cdot \hbar = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$



Átomo de Bohr (1913) – apenas um número quântico

Louis De Broglie(1923): aplicou a teoria onda-partícula na quantização de Bohr: o elétron orbitando o núcleo em raios discretos leva ao conceito de onda de matéria estacionária



$$\lambda = \frac{h}{m_e v}$$



Erwin Schrödinger (1926): Função de onda

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E_T - E_P) \Psi = 0$$

Átomo de Bohr (1913) – apenas um número quântico

Orbital: densidade de probabilidade da localização do elétron “ao redor” do núcleo.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

Second derivative with respect to X → $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$
 Shrodinger Wave Function → ψ
 Position → x
 Energy → E
 Potential Energy → V

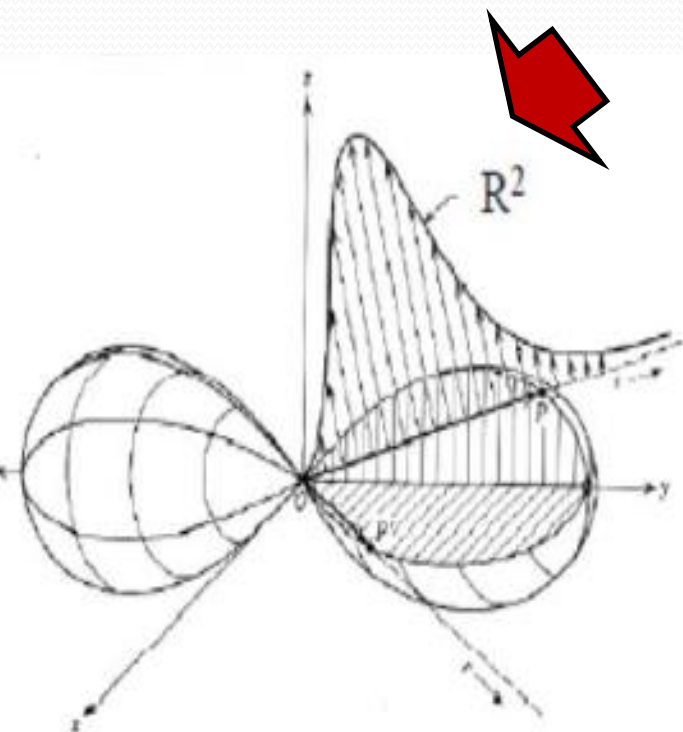
Solução da Eq. Schrödinger: 4 números quânticos

Números Quânticos

n l m_l

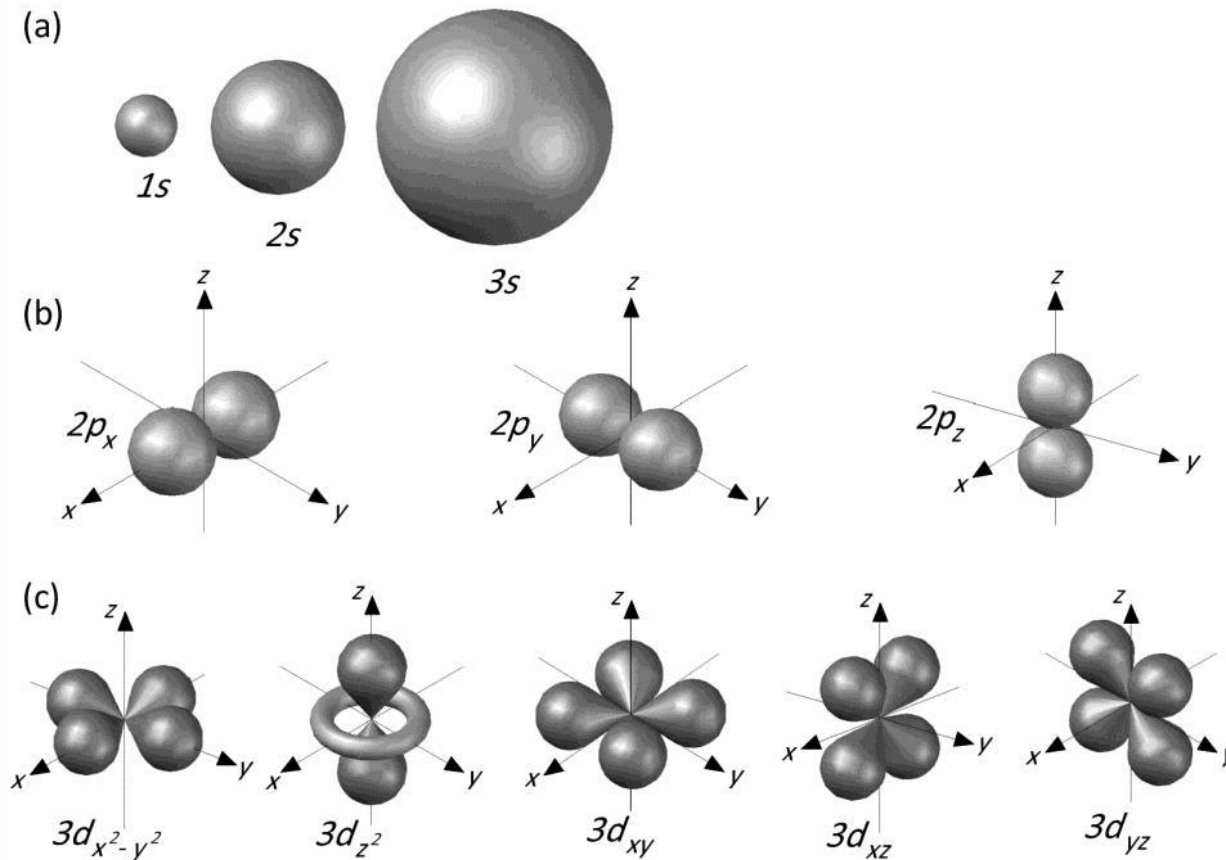
Funções de Onda

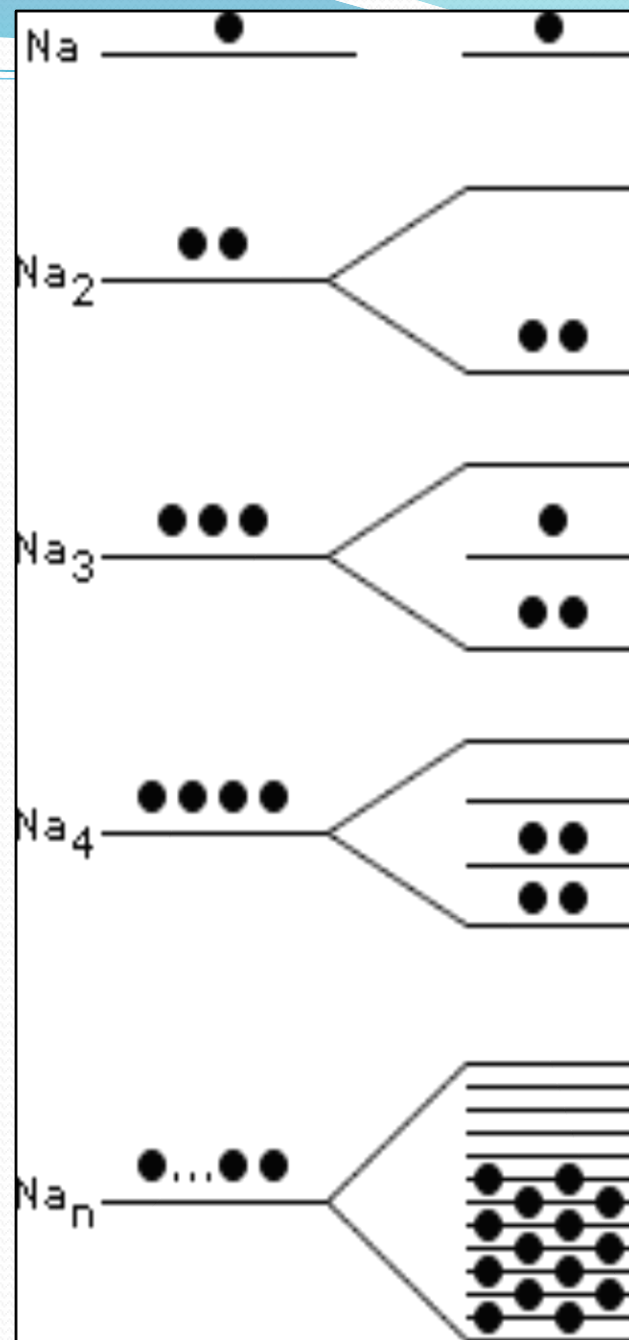
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$



INÍCIO DA FRATURA: NÍVEL SUBATÔMICO - PERTURBAÇÃO DA ONDA ESTACIONÁRIA

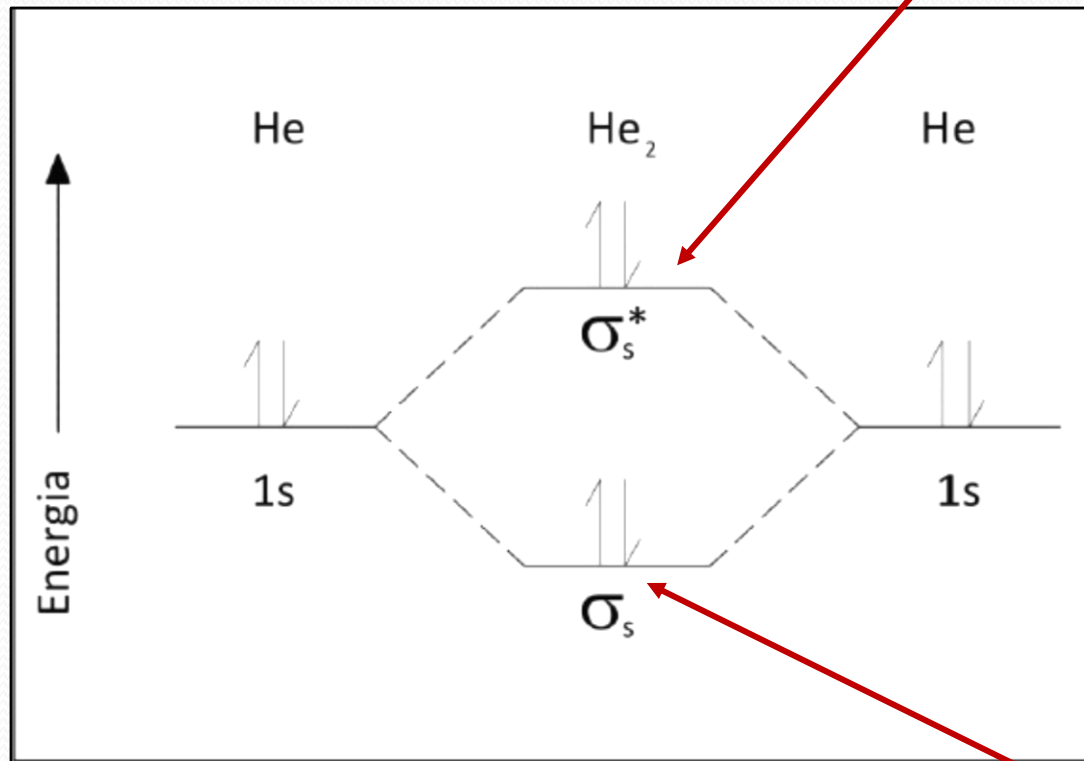
PERTURBAÇÃO DO ORBITAL





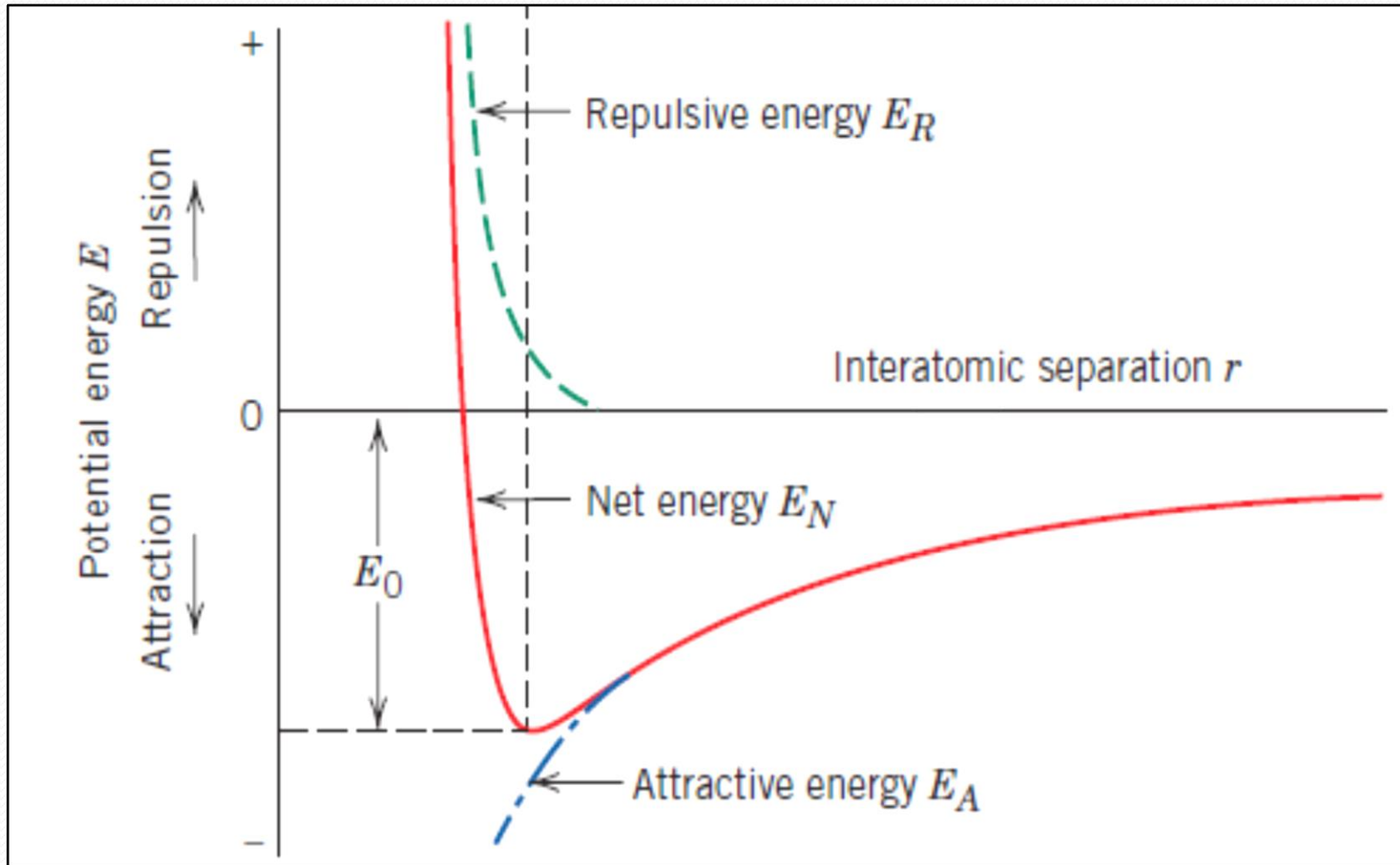
No **balanço final**, a **energia** total dos elétrons do **orbital molecular** tem que ser **menor** que a dos elétrons no **orbital atômico**. Quando essa distribuição é feita para dois átomos de **hélio** se aproximando, a energia total é igual a **zero**. **Não existe a molécula de He₂**

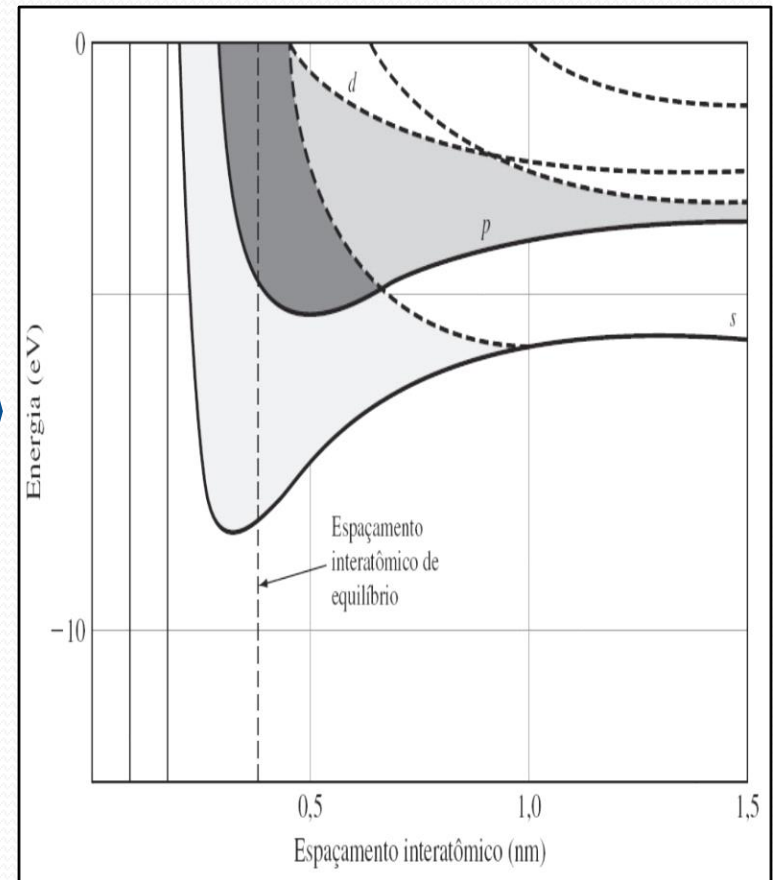
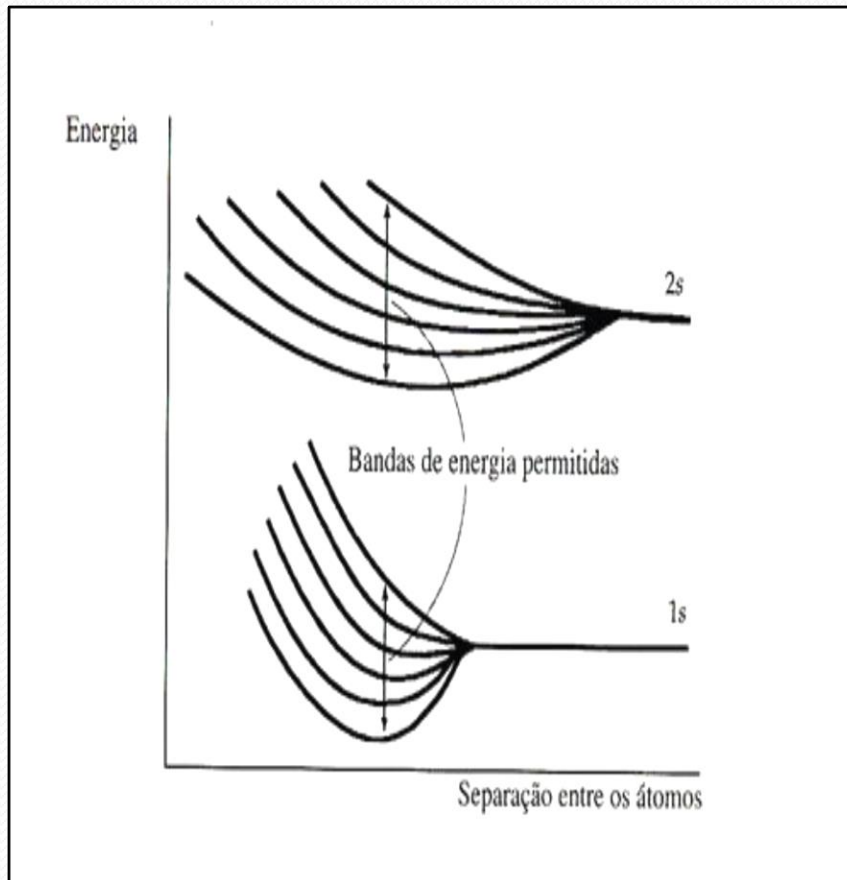
ORBITAL ANTI-LIGANTE (*UNGERAD*)



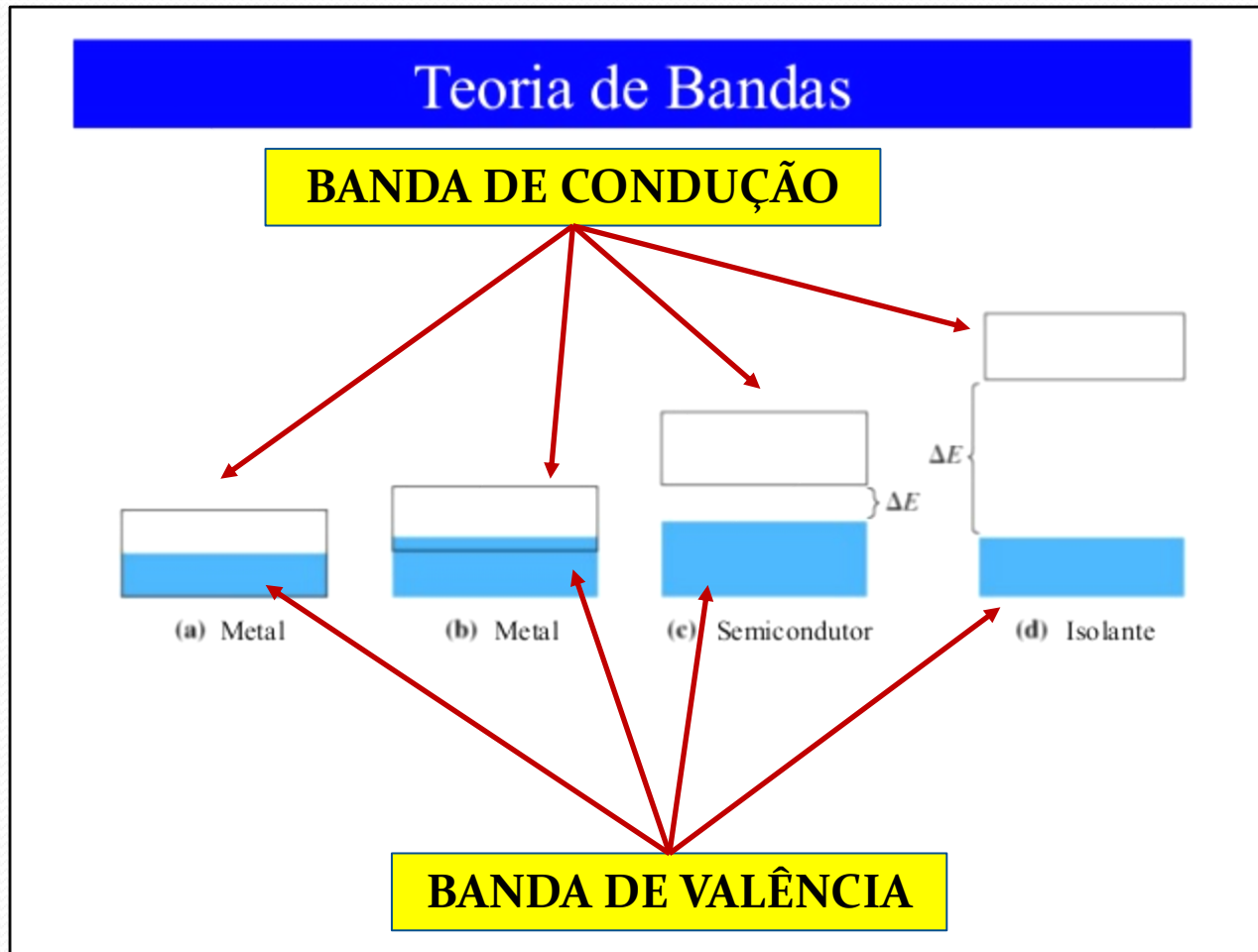
ORBITAL LIGANTE (*GERAD*)

Energia interatômica: Variação da energia potencial resultante da interação entre átomos ou íons.





COM A APROXIMAÇÃO DOS ÁTOMOS, OS NÍVEIS DE ENERGIA SE ALTERAM E VÃO SE ACOMODANDO EM REGIÕES QUE ACABAM POR SE SOBREPOR.

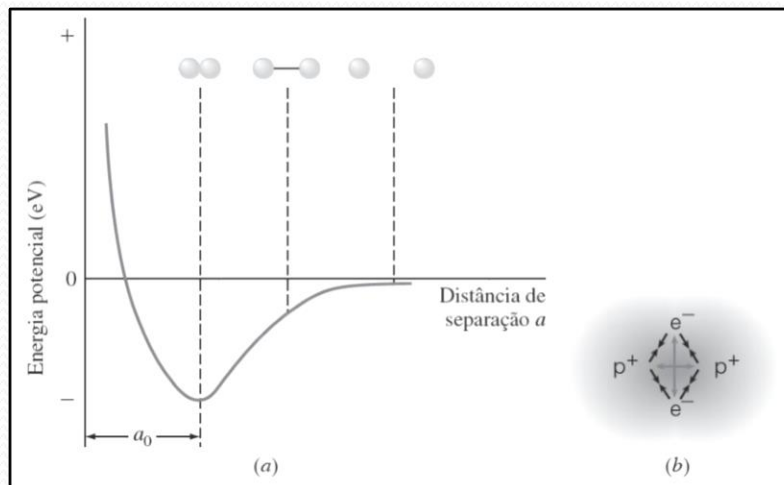
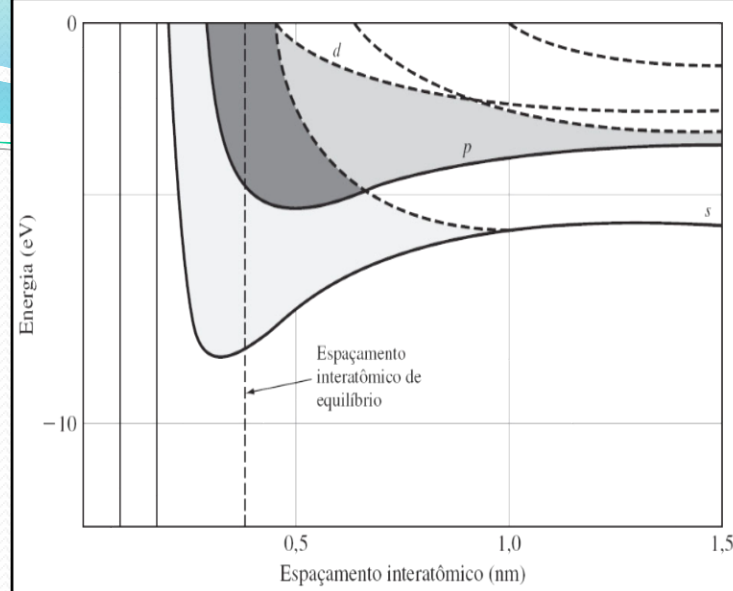
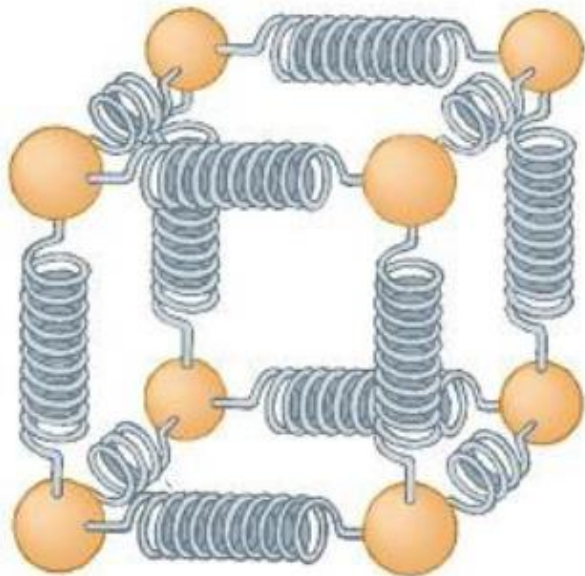


ESSAS REGIÕES SÃO AS BANDAS : VALÊNCIA E CONDUÇÃO

ANÁLISE DE FALHAS

FRATURA - ESCALA ATÔMICA

PERTURBAÇÃO DA ENERGIA DOS ELÉTRONS DA BANDA DE CONDUÇÃO E DE VALÊNCIA



MODELO DE EINSTEIN E DEBYE

MODELO DE EINSTEIN E DEBYE

$$\sigma_{\max} = \left(\frac{E\gamma_s}{a_0} \right)^{1/2} \dots \text{Eq. 1}$$

Where

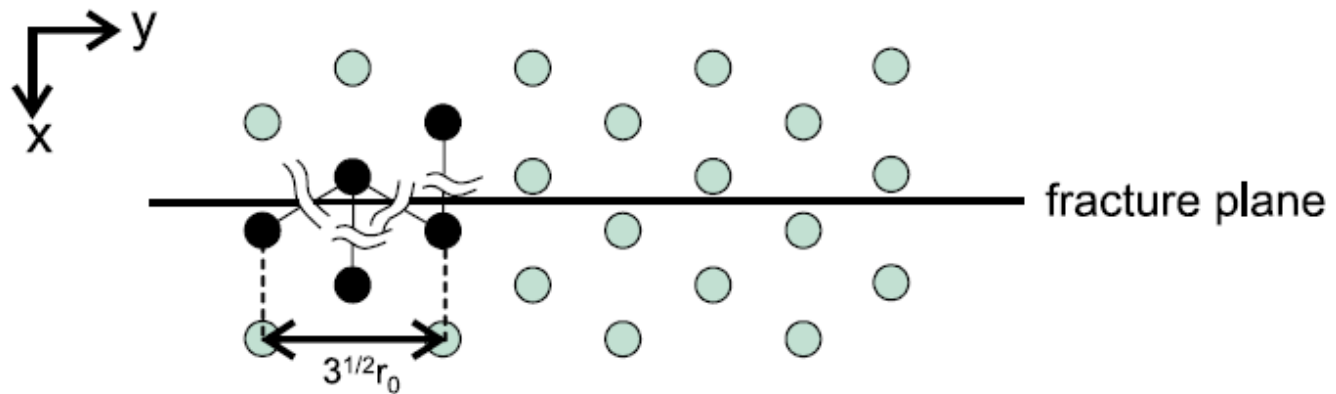
γ_s is the surface energy

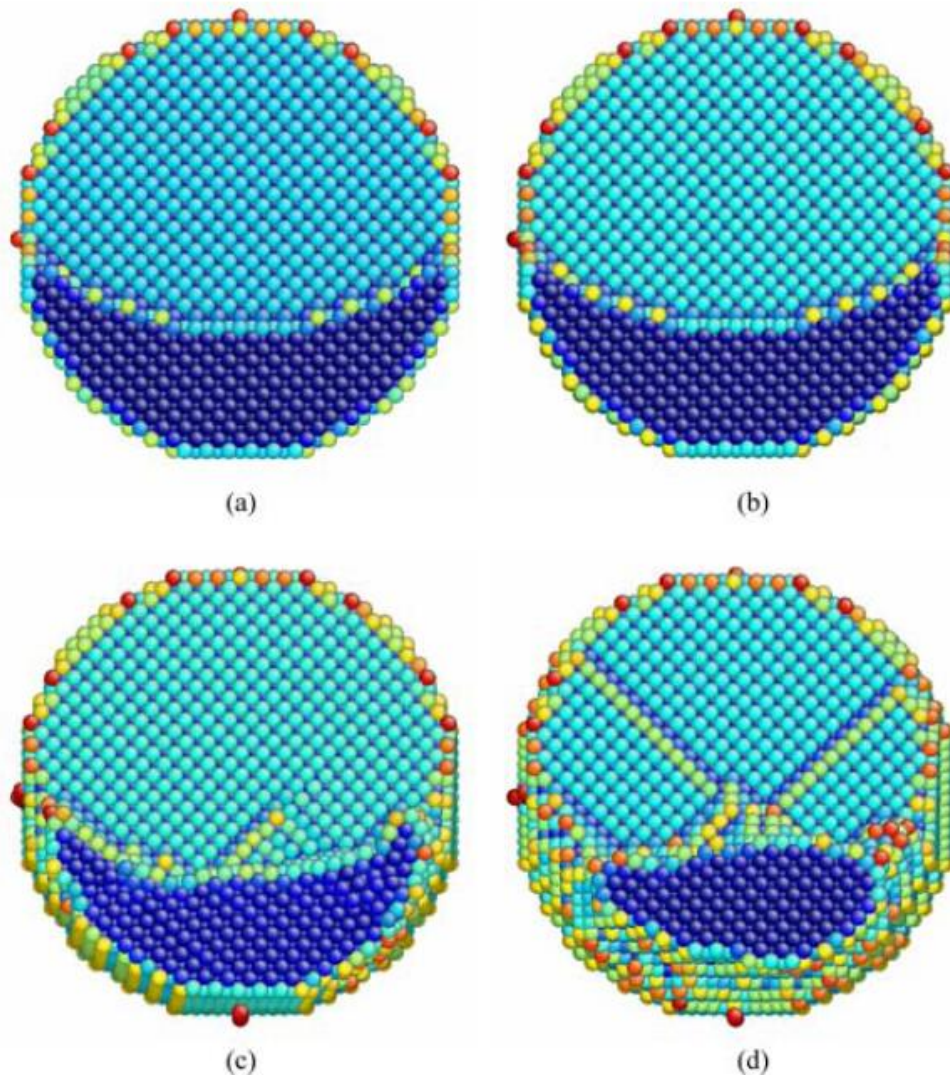
a_0 is the unstrained interatomic spacing.

A energia superficial de fratura (γ) relaciona-se com a tensão necessária para a fratura (σ_{\max}), em nível atômico, pela equação

$$\sigma_{\max} = \left[\frac{\gamma E}{a} \right]^{1/2}$$

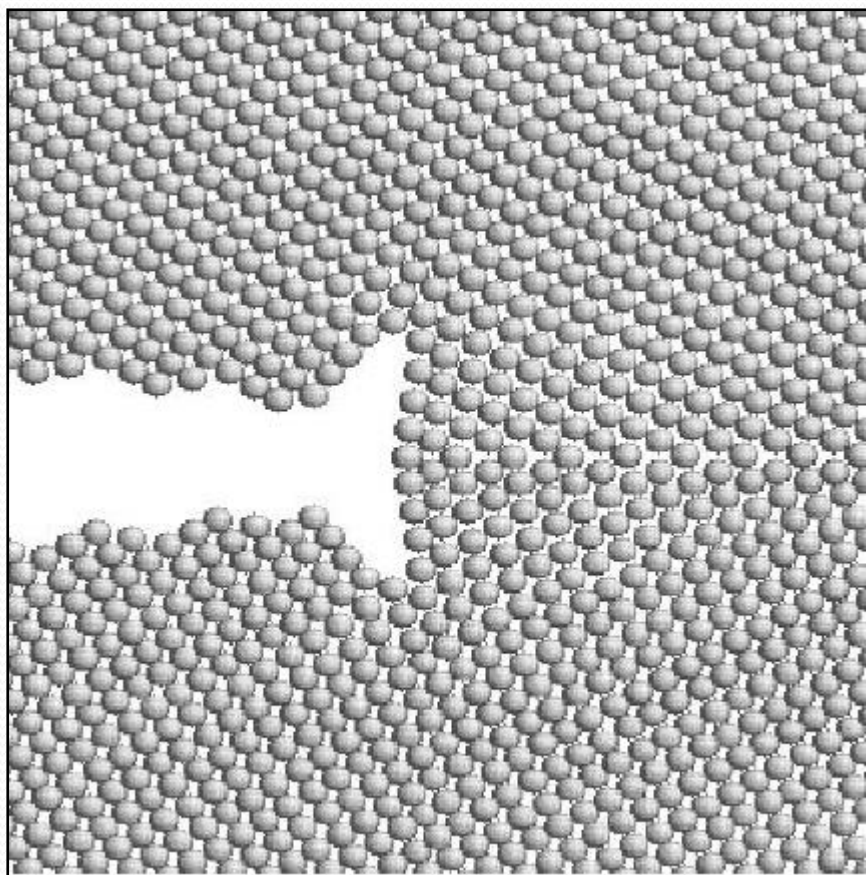
E é o módulo de Young (**força de ligação**) e a é a distância interatômica sem deformação



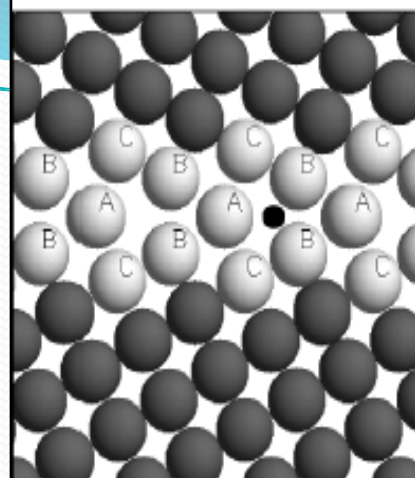


**SIMULAÇÃO:
A ENERGIA DOS
ÁTOMOS SE
ALTERA DURANTE
A FRATURA:
CORES
DIFERENTES.**

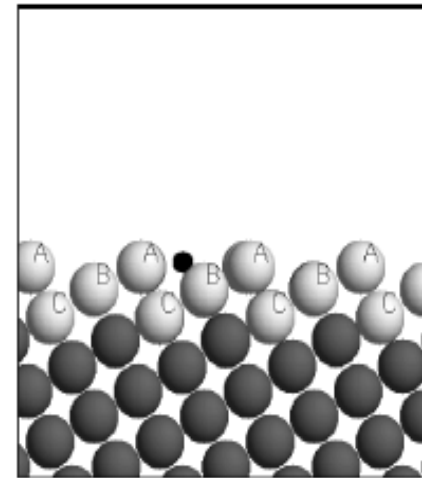
Fig. 10 Transverse mid-sections of the nanowire with crack depth $a = 4.98$ nm: (a) initial configuration; (b)–(d) at elongations $\Delta L/L_0 = 0.04, 0.08$ and 0.12 , respectively. The colour code corresponds to the energy level of the atoms (arbitrary scale).



FRATURA INTERGRANULAR EM Fe PURO



a



b

Fig. 3—Various sites considered for the segregation of Cr and Ni impurities (large, light-colored atoms) and of H and C impurities (small, dark-colored atoms): (a) in the grain boundary and (b) in the (210) free surface.

**SIMULAÇÃO:
ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE
ÁTOMOS SUBSTITUCIONAIS (Cr e
Ni) E INTERSTICIAIS (C e H) NA
FRATURA INTERGRANULAR.**

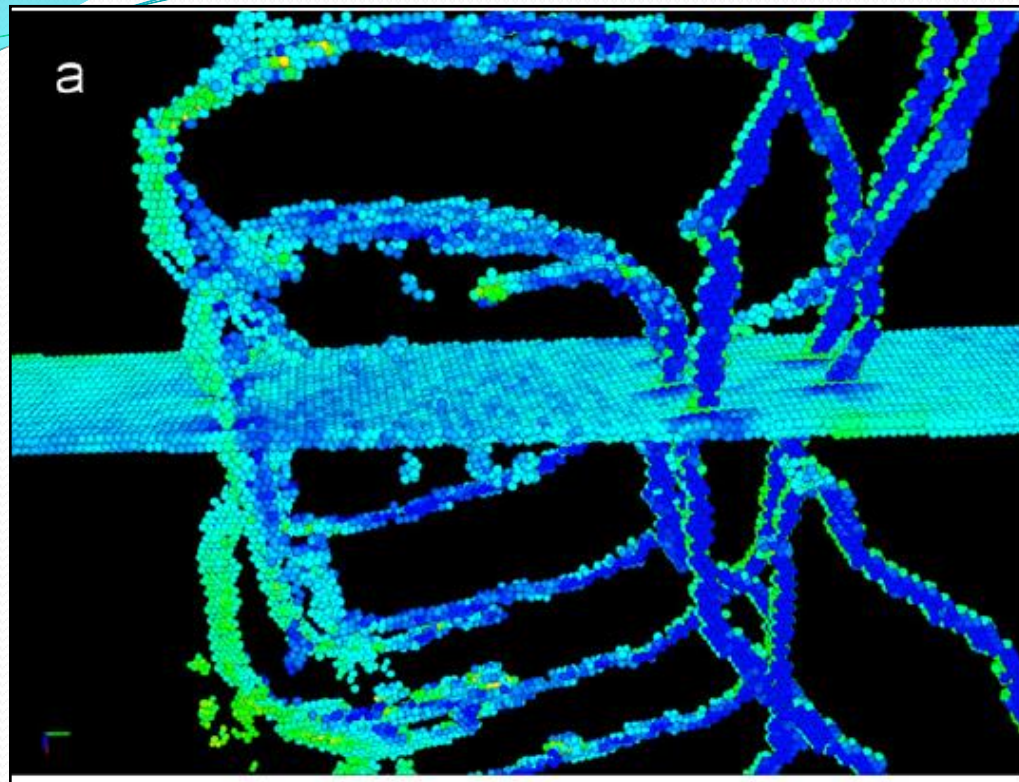
CONCLUSÕES:

- O HIDROGÊNIO REDUZ A ENERGIA DAS LIGAÇÕES E FACILITA A FRATURA INTERGRANULAR;
- COM A ADIÇÃO DE C (4 LIGAÇÕES sp_3) A COESÃO INTERGRANULAR AUMENTA MUITO, FAZENDO COM QUE A TRINCA SE DESVIE PARA O INTERIOR DO GRÃO QUANDO ENCONTRA UMA IMPUREZA DE C (CLUSTER, CARBONETOS, ETC);
- Ni E Cr TÊM INFLUÊNCIA BEM MENOR.

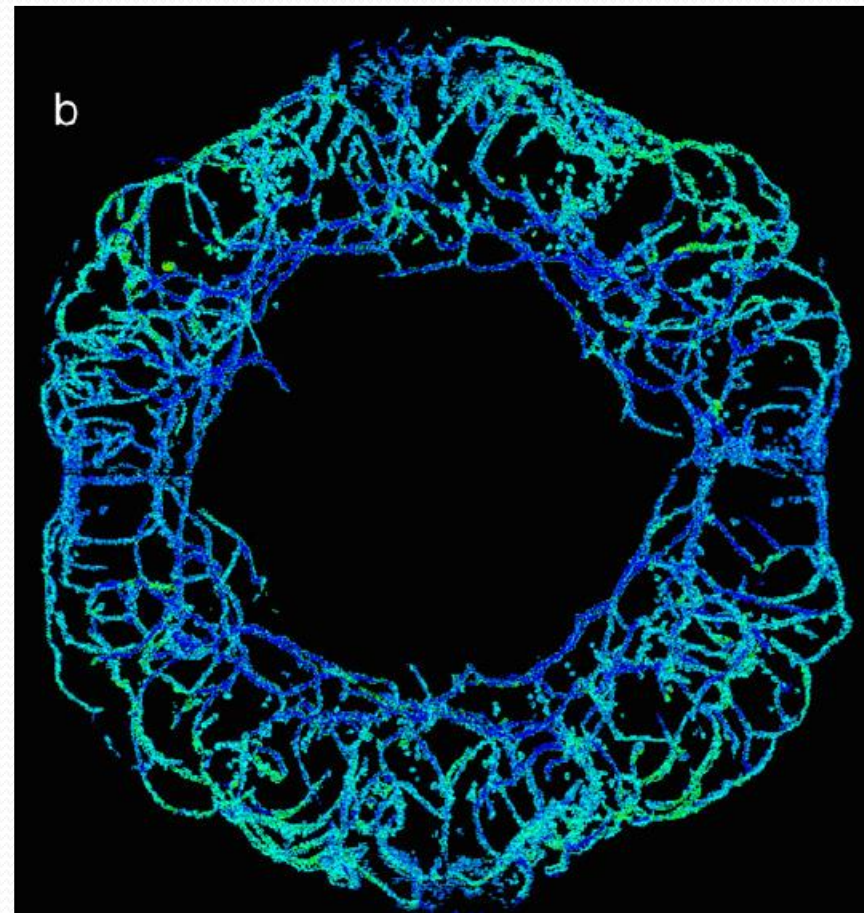
ANÁLISE DE FALHAS

MODELOS ATOMÍSTICOS

FILME MODELO ATOMÍSTICO



**LOOP DE LINHAS DE
DISCORDÂNCIAS FORMADAS
DURANTE FRATURA POR IMPACTO**

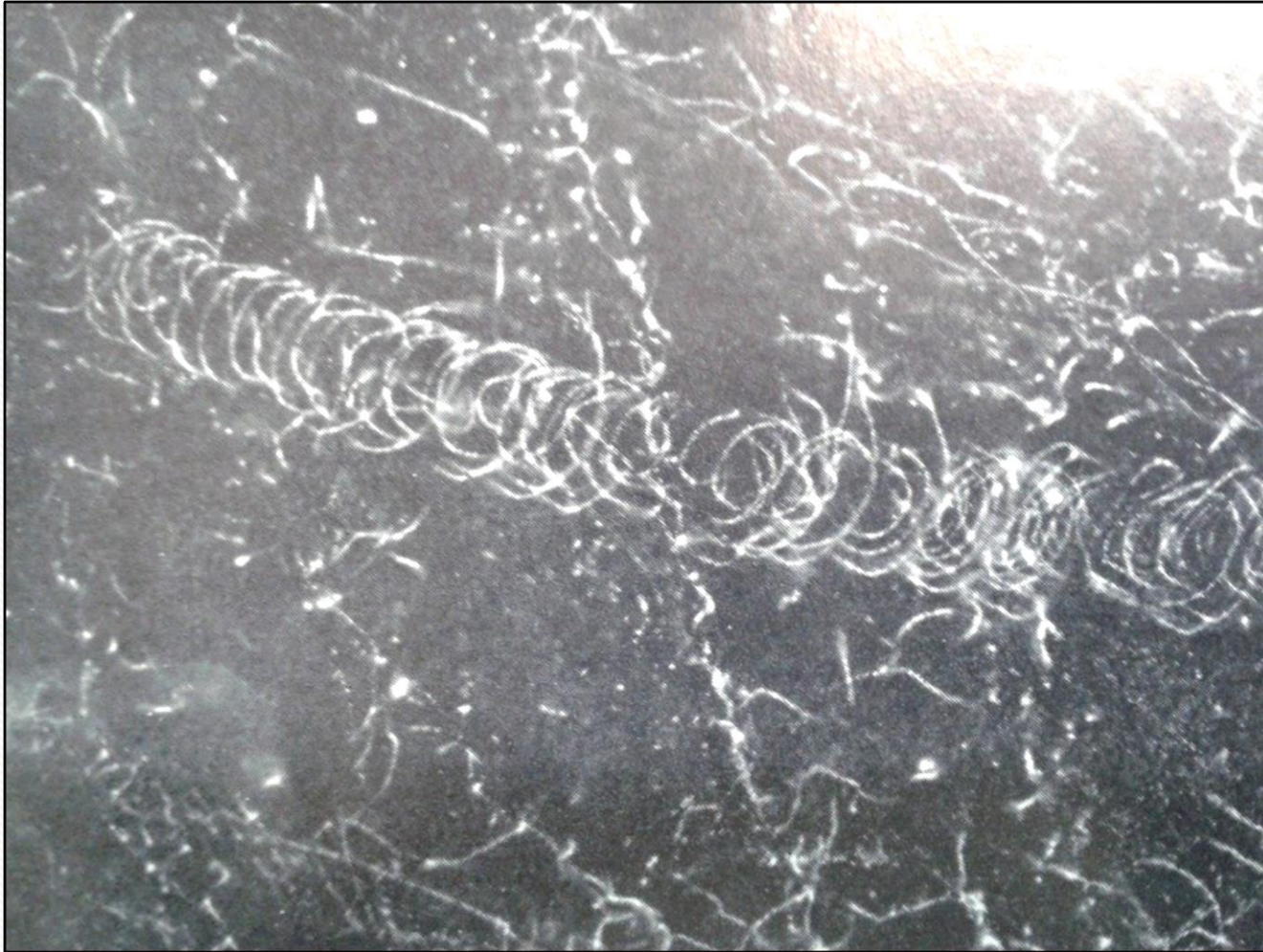


**LOOP DE DISCORDÂNCIAS É
FORMADA TAMBÉM NA
FRAGILIZAÇÃO POR HIDROGÊNIO
E FRAGILIZAÇÃO POR RADIAÇÃO**

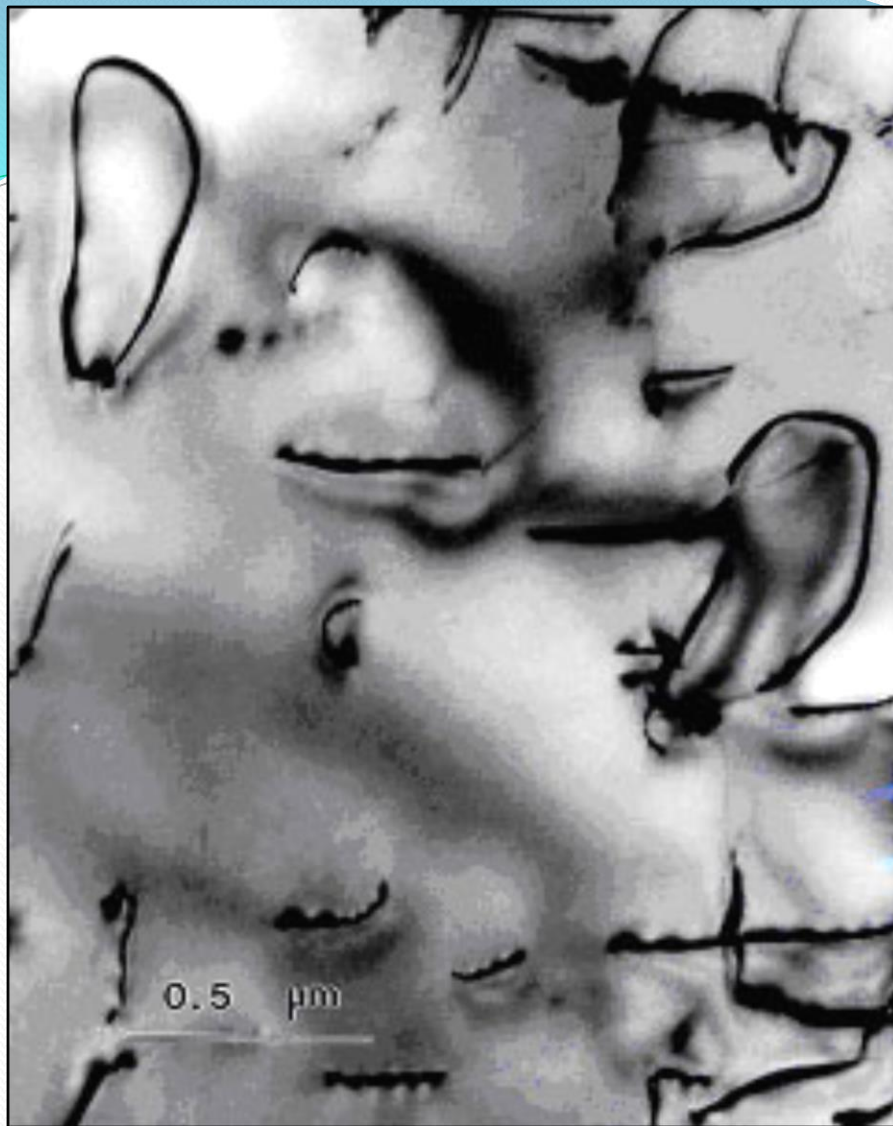
ANÁLISE DE FALHAS

MODELOS ATOMÍSTICOS

FILME LINHA DE DISCORDÂNCIA NA TRINCA

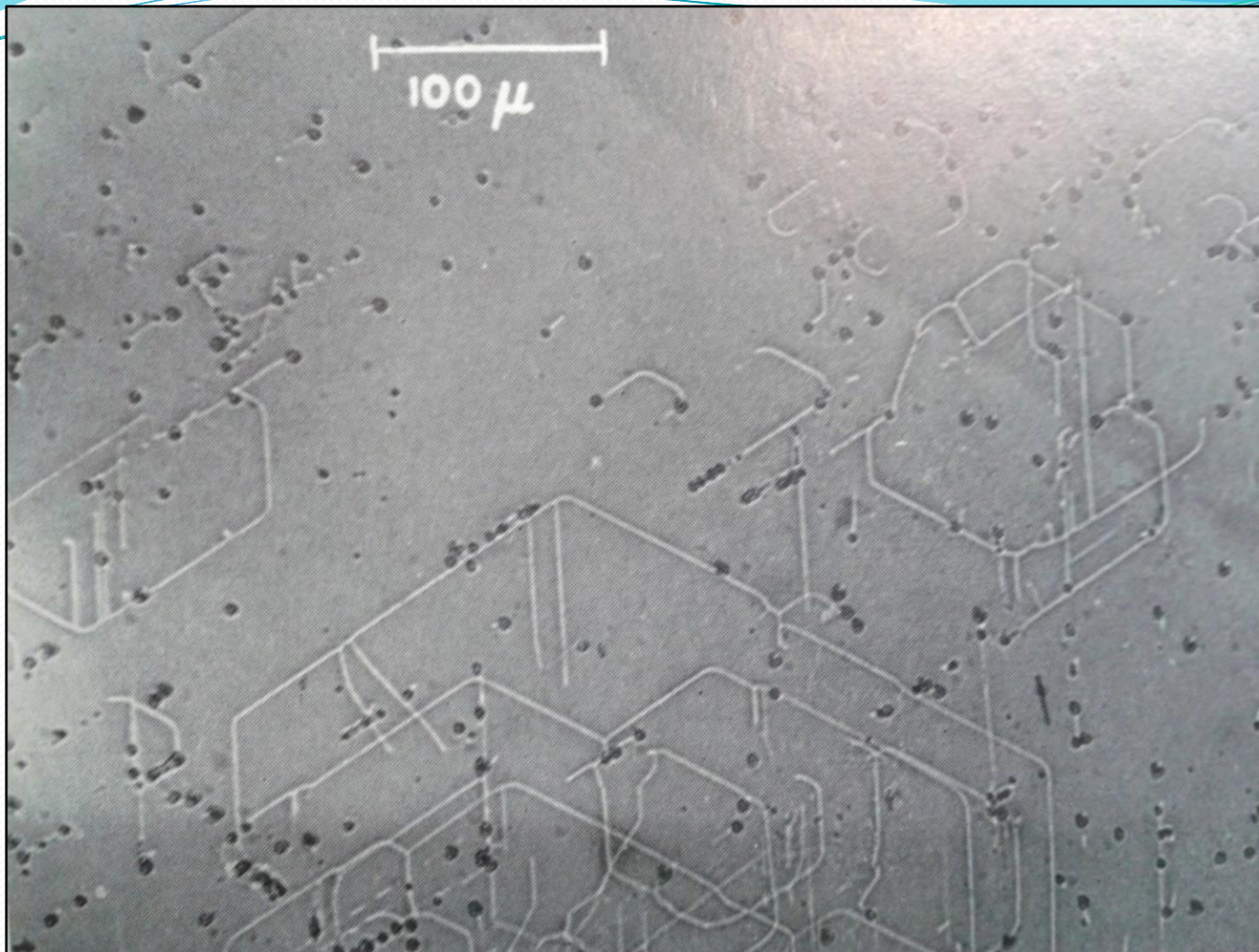


NUCLEAÇÃO DE TRINCA EM LOOP DE DISCORDÂNCIAS (MET)



**LOOP DE DISCORDÂNCIAS EM
FELDSPATO DEFORMADO:
GEOLOGIA! SEGUNDO
WEERTMAN (Elementary
Dislocation Theory , 1964) ATÉ AS
AVALANCHES E DESLIZAMENTOS
DE TERRA OCORREM POR
MECANISMOS DE LINHAS DE
DISCORDÂNCIA - MET)**

<http://pangea.stanford.edu/~dpollard/NSF/main.html>



LOOP DE DISCORDÂNCIAS EM Si (MET)



FIM