

# ANALISIS ENERGETICO DE UN MECANISMO DE FRACTURA POR TERMOFLUENCIA

L. Martínez

Instituto de Física, UNAM  
Apartado Postal 20-364. 01000 México, D.F.

(recibido enero 25, 1983; aceptado agosto 18, 1983)

## RESUMEN

Se propone un modelo de fractura de metales por crecimiento difusivo de cavidades intergranulares. Se supone que las cavidades crecen en forma de grietas que se propagan a lo largo de las fronteras de grano. El acoplamiento de los procesos difusivos en la superficie de las cavidades y en las fronteras de grano se establece con las ecuaciones del balance energético del proceso y de la continuidad del flujo atómico.

## ABSTRACT

A model for fracture of metals due to intergranular cavity growth is proposed. The cavities are assumed to grow with a crack-like shape which propagates along the grain boundaries normal to the applied stress. The diffusive processes on the cavity surfaces and in the grain boundaries are coupled by equations for energy balance and atomic flux continuity.

## 1. INTRODUCCION

La pérdida de ductilidad de algunos materiales cuando se someten a condiciones de termofluencia ha sido comúnmente asociada a la nucleación, al crecimiento y a la coalescencia de cavidades en fronteras de grano<sup>(1,2)</sup>. Se ha detectado que los mecanismos dominantes del crecimiento de cavidades intergranulares son: la autodifusión, en las superficies de éstas y en las fronteras de grano<sup>(3)</sup>; y la deformación plástica en la matriz<sup>(4)</sup>. Cuando la densidad de cavidades es baja, el crecimiento puede ser controlado por la deformación plástica combinada con la autodifusión<sup>(4)</sup>. En el caso opuesto, cuando la nucleación de cavidades es abundante, su crecimiento es controlado principalmente por mecanismos difusivos<sup>(5)</sup>.

El crecimiento difusivo de cavidades ha sido modelado considerando que la materia se difunde desde la superficie de las cavidades hacia las fronteras de grano adyacentes. En las superficies la difusión es impulsada por los gradientes de curvatura y en las fronteras de grano por los gradientes de las tracciones en la dirección normal. Los primeros desarrollos teóricos modelaron el crecimiento de cavidades controlado por la difusión en las fronteras de grano, suponiendo que la difusión en la superficie de la cavidad ocurre con mucha mayor rapidez<sup>(6)</sup>. En este caso las cavidades mantienen durante el crecimiento la forma lenticular de equilibrio. En general estos modelos coinciden en predecir que la velocidad de crecimiento es proporcional al coeficiente de difusión en la frontera de grano y a la primera potencia del esfuerzo aplicado.

La consideración de la difusión en la superficie de la cavidad como factor limitante del crecimiento dio lugar a modelos donde se establece que la cavidad crece desarrollando superficies en forma de grieta que penetran a lo largo de las fronteras de grano adyacentes<sup>(7,8)</sup>. Chuang y Rice<sup>(8)</sup> encontraron una superficie que es una solución bien aproximada de la ecuación de difusión superficial. Cuando esta solución se aplica al crecimiento de cavidades, se concluye que la velocidad de sus puntos es proporcional al coeficiente de difusión superficial y a una potencia entre  $3/2$  y  $3$  del esfuerzo aplicado, dependiendo del valor de la razón de

difusividades,  $D_b \delta_b / D_s \delta_s$  <sup>(9)</sup>. Esta solución ha encontrado apoyo en los resultados experimentales de Goods y Nix <sup>(10)</sup>, y Nieh y Nix <sup>(11)</sup>, quienes estudiaron el crecimiento de cavidades en plata y cobre, respectivamente.

En el presente trabajo se hace un análisis del avance de una superficie de Chuang y Rice <sup>(8)</sup> desde el punto de vista energético <sup>(12)</sup>. Las fuentes energéticas del crecimiento de cavidades en condiciones de termofluencia están asociadas con la cedencia al esfuerzo aplicado y con la eliminación de superficie de frontera de grano. Esta energía se emplea en la creación de nueva superficie de cavidad y se disipa durante el transporte difusivo en las superficies y en la frontera de grano. Del análisis resultan fórmulas para la velocidad de crecimiento de cavidades y para el tiempo de ruptura.

## 2. ECUACIONES

Consideremos un arreglo de cavidades bidimensionales igualmente espaciadas en una frontera de grano horizontal donde el material está sujeto a un esfuerzo externo  $\sigma$  en la dirección vertical, como se muestra en la Fig. 1.

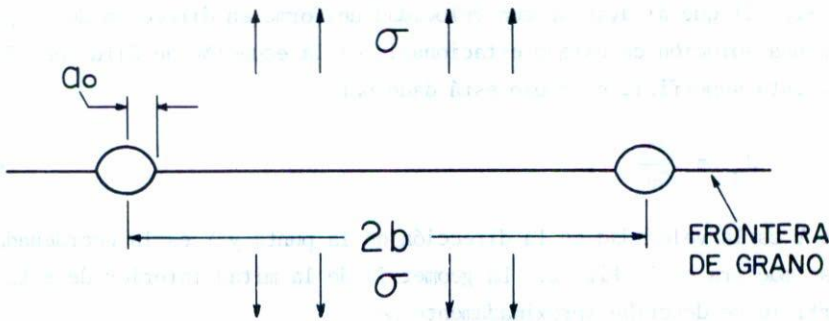


Fig. 1 Arreglo periódico de cavidades localizadas en una frontera de grano en la dirección normal al esfuerzo aplicado.

### a) Difusión en la superficie

En las superficies de la cavidad la diferencia de potencial químico entre un punto de curvatura  $K$  y uno de curvatura cero está dada

por<sup>(13)</sup>

$$\Delta\mu = -\Omega\gamma_s K \quad , \quad (1)$$

donde  $\Omega$  es el volumen atómico y  $\gamma_s$  es la energía libre de superficie. Los gradientes de curvatura a lo largo de la superficie producen el flujo de materia

$$J_s = \frac{D_s \gamma_s}{kT} \frac{\partial K}{\partial S} \quad , \quad (2)$$

donde  $D_s$  es el coeficiente de autodifusión en la superficie,  $k$  la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura absoluta y  $S$  la longitud de arco. La ecuación de conservación de materia correspondiente es

$$V_n = \frac{D_s \gamma_s \delta_s}{kT} \frac{\partial^2 K}{\partial S^2} \quad , \quad (3)$$

donde  $\delta_s$  es el grosor donde ocurre la difusión superficial y  $V_n$  es la velocidad de la superficie en la dirección normal a sí misma.

Chuang y Rice<sup>(8)</sup> obtuvieron una superficie en forma de grieta (ver Fig. 2) que al avanzar con velocidad uniforme en dirección de la punta es una solución de estado estacionario de la ecuación de difusión (3). Sobre esta superficie el flujo está dado por

$$J_s = \frac{VY}{\Omega\delta_s} \quad , \quad (4)$$

donde  $V$  es la velocidad en la dirección de la punta y  $Y$  es la coordenada que se muestra en la Fig. 2. La geometría de la mitad inferior de esta superficie se describe aproximadamente por

$$\text{sen } \theta = 1 - \frac{1}{2} \left[ kTV/D_s \delta_s \gamma_s \Omega \right]^{2/3} Y^2 \quad , \quad (5)$$

donde el ángulo  $\theta$  se muestra en la Fig. 2. La potencia disipada por el flujo en la superficie,

$$P_s = \int \frac{\partial \Delta\mu}{\partial S} J_s \delta_s dS \quad , \quad (6)$$

se calcula sustituyendo las Ecs. (2), (4),  $dS = dY/\cos \theta$  y (5):

$$P_s = -2\gamma_s V \xi \quad , \quad (7)$$

donde  $\xi = 4 \left\{ 1 - \left[ \frac{1}{2} (1 + \gamma_b/2 \gamma_s) \right] \right\} + 1 - \gamma_b/2\gamma_s$  es una función del ángulo de capilaridad en la punta de la grieta y  $\gamma_b$  es la energía libre de superficie de frontera de grano. El avance de la superficie crea área nueva de cavidad y requiere una potencia dada por

$$P_{\gamma_s} = -2\gamma_s V \quad . \quad (8)$$

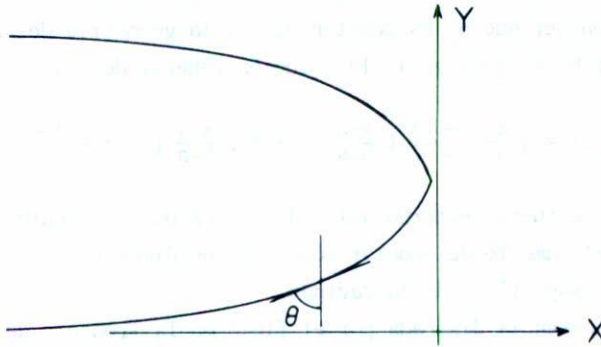


Fig. 2 Superficie en forma de grieta que es una solución de estado estacionario de la ecuación de difusión.

#### b) Difusión en la frontera de grano

Si los esfuerzos de corte se relajan por el deslizamiento de las fronteras de grano, quedan en éste únicamente las tracciones normales,  $T_n$ <sup>(14)</sup>. El exceso de potencial químico de los átomos en un punto de la frontera de grano relativo al estado libre de esfuerzo es<sup>(15)</sup>

$$\Delta\mu = -\Omega T_n \quad , \quad (9)$$

donde la tracción  $T_n$  es positiva cuando es tensil. El flujo de materia es impulsado por los gradientes del potencial químico, entonces

$$J_b = \frac{D_b}{kT} \frac{\partial T_n}{\partial x} \quad , \quad (10)$$

donde  $D_b$  es el coeficiente de autodifusión en la frontera de grano y  $x$  es una coordenada definida en la Fig. 1. La conservación de materia se expresa en la ecuación

$$\frac{D_b \delta_b}{2kT} \frac{\partial^2 T_n}{\partial x^2} + \dot{u}_n = 0 \quad , \quad (11)$$

donde  $\delta_b$  es el grosor de la frontera de grano y  $\dot{u}_n$  es la rapidez de acumulación de volumen por unidad de área de frontera de grano. Hay un transitorio elástico involucrado en la Ec. (11)<sup>(14)</sup>, sin embargo la contribución de este transitorio al crecimiento de la cavidad es despreciable<sup>(16)</sup> y se puede suponer que  $\dot{u}_n$  es constante. Si la geometría del problema es como se describe en la Fig. 1, la solución general de (11) es

$$T_n(x) = \frac{\sigma}{1-a/b} \left[ -\frac{A}{2} \left( \frac{x-a}{b-a} \right)^2 + A \left( \frac{x-a}{b-a} \right) + 1 - \frac{A}{3} \right] \quad , \quad (12)$$

donde  $\sigma$  es el esfuerzo externo aplicado y  $A$  es una constante que quedará definida en el momento de acoplar los procesos difusivos en la frontera de grano y en la superficie de la cavidad.

La potencia disipada por el flujo en la frontera de grano,

$$P_b = \int \frac{\partial \Delta \mu}{\partial x} J_b \delta_b dx \quad , \quad (13)$$

se calcula mediante las Ecs. (9), (10) y (12):

$$P_b = - \frac{D_b \delta_b \Omega \sigma^2 A^2}{3kTb(1-a/b)^3} \quad . \quad (14)$$

El avance de la grieta causa la eliminación de frontera de grano produciendo una potencia dada por

$$P_{\gamma_b} = \gamma_b V \quad . \quad (15)$$

### c) Balance energético

La fuente principal de energía para el crecimiento de las cavidades es la pérdida de energía potencial de la carga aplicada en el expe-

rimento de termofluencia como se muestra en la Fig. 3. Esta potencia está dada por

$$P_{\sigma} = \sigma b \dot{u}_n, \quad (16)$$

donde  $\dot{u}_n$  es la velocidad de la carga al bajar y coincide con la rapidez de acumulación de volumen por unidad de área de frontera de grano, la cual aparece en la Ec. (11). Mediante la solución (12) se obtiene que

$$P_{\sigma} = \frac{D_b \delta_b \Omega \sigma^2 A}{kTb(1-a/b)^2} \quad (17)$$

El balance de energía del crecimiento de cavidades está dado por (12)

$$P_{\sigma} + P_b + P_s + P_{\gamma_s} + P_{\gamma_b} = 0 \quad (18)$$

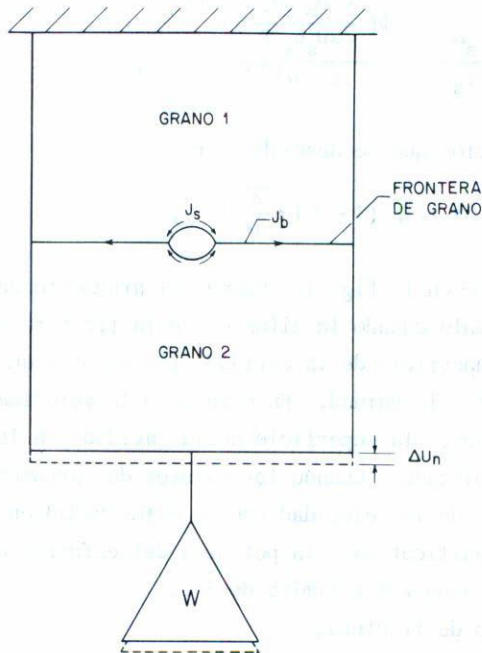


Fig. 3 Representación esquemática de la reducción de energía potencial del sistema debido al flujo de materia de la cavidad hacia las fronteras de grano.

Al sustituir cada uno de los resultados (7), (8), (14), (15) y (17) se obtiene

$$\frac{A}{(1-a/b)^3} (1-A/3) - \frac{2kTb\gamma_s \xi}{D_b \delta_b \Omega \sigma^2} V = 0 \quad (19)$$

La condición de continuidad del flujo en la unión de la superficie de la cavidad y la frontera de grano ( $2\delta_s J_s = \delta_b J_b$ ) permite obtener la ecuación

$$V^{2/3} = \frac{D_b \delta_b \sigma A}{2\alpha b (1-a/b)^2} \left( \frac{\Omega^2}{k^2 T^2 D_s \delta_s \gamma_s} \right)^{1/3} \quad (20)$$

donde  $\alpha = [2(1-\gamma_b/2\gamma_s)]^{1/2}$ .

De las Ecs. (19) y (20) se despeja la velocidad de avance de la grieta:

$$V = \frac{D_s \delta_s \Omega \sigma^3}{kT\gamma_s^2} \frac{\{\phi(\frac{\xi^2 D_b \delta_b \gamma_s}{2\alpha D_s \delta_s \sigma b})\}^{3/2}}{(1-a/b)^3} \quad (21)$$

donde  $\phi$  es una función que se describe por

$$\phi(x) = 3x + \frac{9x}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4}{3x}}\right) \quad (22)$$

y su gráfica aparece en la Fig. 4. Cuando el argumento de la función  $\phi$  es grande, por ejemplo cuando la difusión en la frontera de grano es más rápida que en la superficie de la cavidad, los valores que toma se acercan asintóticamente a la unidad. En este caso la velocidad es proporcional a la difusividad en la superficie de la cavidad y a la tercera potencia del esfuerzo aplicado. Cuando los valores del argumento no son grandes, la dependencia de la velocidad con la difusividad en la frontera de grano se vuelve significativa y la potencia del esfuerzo aplicado puede reducirse de 3 hasta un valor límite de 3/2.

El tiempo de fractura,

$$t_r = \int_{a_0}^b \frac{da}{V(a)} \quad ,$$



se calcula y resulta

$$t_r = \frac{kTb\gamma_s^2 \xi^3 (1-a_0/b)^4}{4D_s \delta_s \Omega \sigma^3 \alpha^3 \left[ \phi \left( \frac{\xi^2 D_b \delta_b \gamma_s}{2\alpha D_s \delta_s \sigma b} \right) \right]^{3/2}}, \quad (23)$$

donde  $a_0$  es la mitad del diámetro inicial de la cavidad.

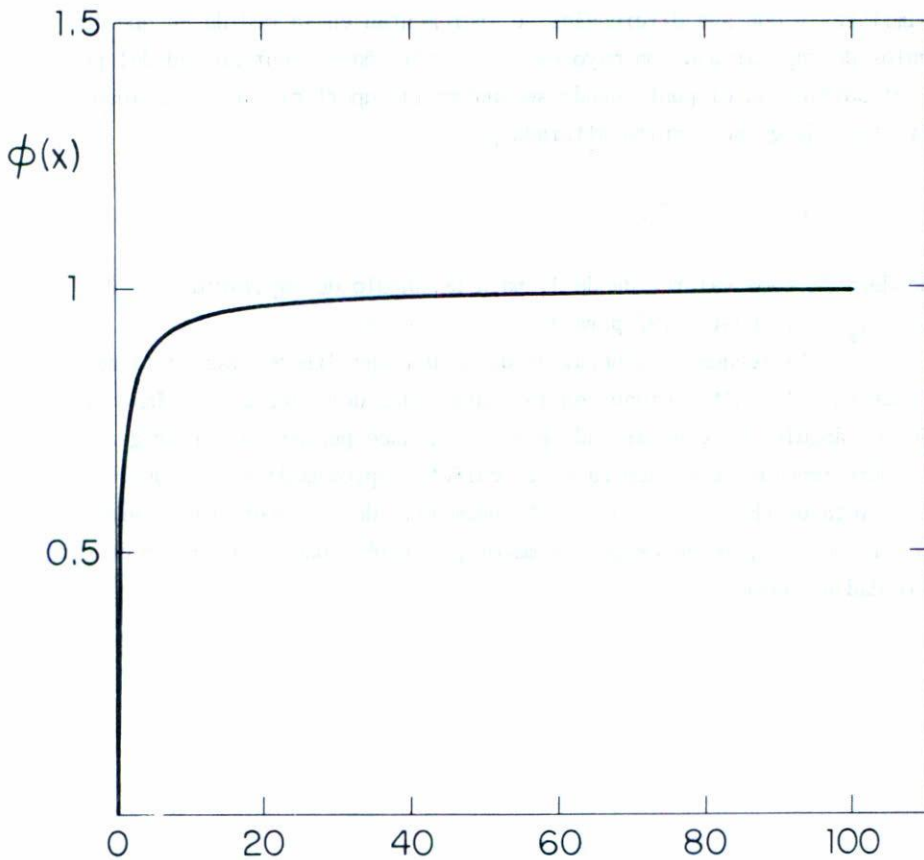


Fig. 4 Gráfica de la función  $\phi$ .

## 3. RESULTADOS

En las Figs. 5, 6 y 7 se grafican en forma logarítmica tiempos de ruptura versus esfuerzos externos en diferentes condiciones y se comparan con los resultados de Chuang et al.<sup>(9)</sup> En cada gráfica puede apreciarse la dependencia inversa del tiempo de ruptura con alguna potencia del esfuerzo externo para diferentes valores de la razón de difusividad. En general puede decirse que los dos tratamientos conducen a resultados similares y que sus diferencias se incrementan en la medida en que los ángulos de capilaridad son mayores. La condición de continuidad del potencial químico en el punto donde se juntan la superficie de la cavidad y la frontera de grano resulta alterada por

$$\Delta\mu_s = \frac{\alpha^2}{\xi} \Delta\mu_b \quad , \quad (24)$$

donde  $\alpha^2/\xi$  toma valores desde 1, para un ángulo de capilaridad de  $0^\circ$  ( $\gamma_b/2\gamma_s = 1$ ), hasta 0.92 para  $90^\circ$  ( $\gamma_b/2\gamma_s = 0$ ).

La tendencia general de disminuir las diferencias en tiempo de fractura y las alteraciones en la continuidad del potencial químico cuando los ángulos de capilaridad se reducen, hace pensar que el origen de las diferencias se encuentra en el carácter aproximado de la superficie de grieta de Chuang y Rice<sup>(8)</sup>. La geometría de la superficie, aproximada por la Ec. (5), se describe con mayor precisión cuando el ángulo de capilaridad es pequeño.

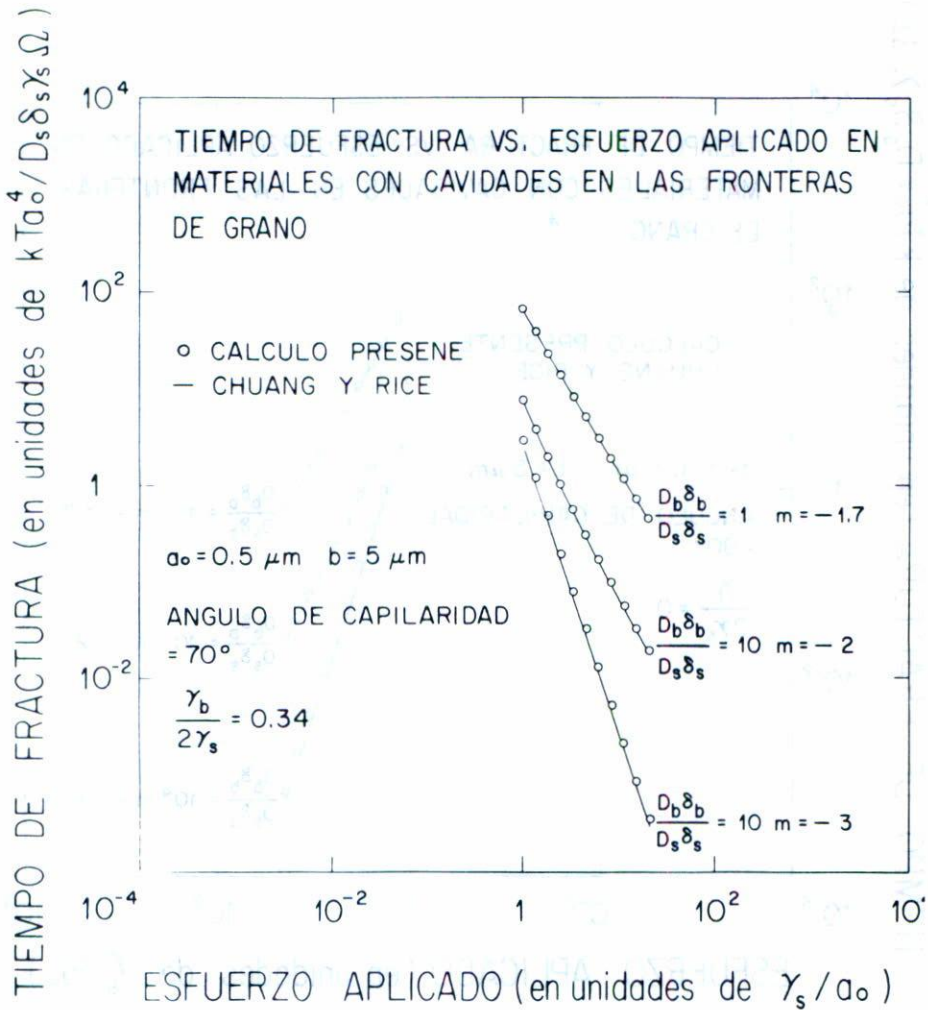


Fig. 5 Gráfica de tiempo de fractura versus esfuerzo aplicado en un material con cavidades en sus fronteras de grano y donde la desorientación entre los dos granos es muy pequeña ( $\gamma_b \approx 0$ ).

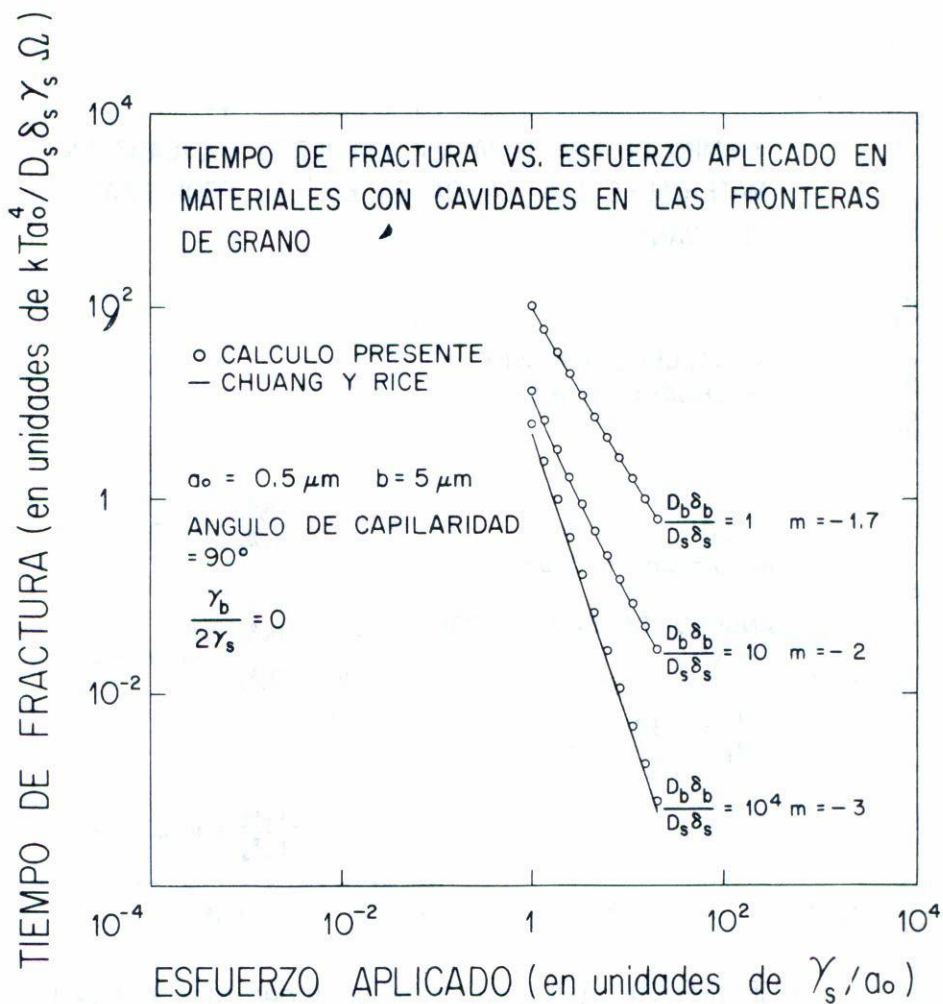


Fig. 6 Gráfica de tiempo de fractura versus esfuerzo aplicado en un material con cavidades en sus fronteras de grano donde el ángulo de capilaridad es de  $70^\circ$ .

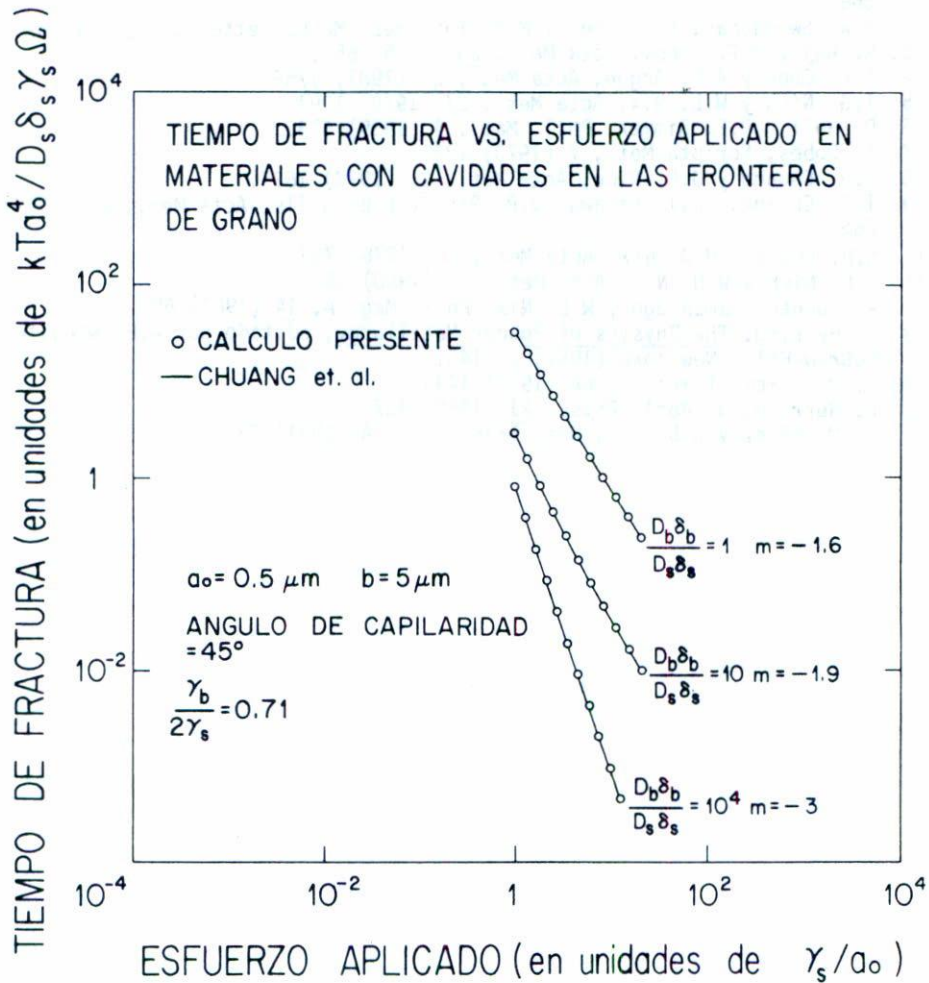


Fig. 7 Gráfica de tiempo de fractura versus esfuerzo aplicado en un material con cavidades en sus fronteras de grano, donde el ángulo de capilaridad es de  $45^\circ$ .

## REFERENCIAS

1. A.G. Evans, J.R. Rice y J.P. Hirth, *J. Amer. Ceram. Soc.*, 63 (1980) 368.
2. R.W. Swindeman, K. Farrel y M.H. Yoo, *Res. Mech. Letters*, 1 (1981) 67.
3. R. Raj y M.F. Ashby, *Acta Met.*, 23 (1975) 653.
4. I.W. Chen y A.S. Argon, *Acta Met.*, 29 (1981) 1759.
5. T.G. Nieh y W.D. Nix, *Acta Met.*, 27 (1979) 1097.
6. D. Hull y R.E. Rimmer, *Phil. Mag.*, 4 (1959) 673.
7. F. Dobes, *Scripta Met.*, 7 (1973) 1231.
8. T.J. Chuang y J.R. Rice, *Acta Met.*, 21 (1973) 1625.
9. T.J. Chuang, K.T. Kagawa, J.R. Rice y L.B. Sills, *Acta Met.*, 27 (1979) 265.
10. S.H. Goods y W.D. Nix, *Acta Met.*, 26 (1978) 739.
11. T.G. Nieh y W.D. Nix, *Acta Met.*, 28 (1980) 557.
12. R. Fuentes-Samaniego y W.D. Nix, *Phil. Mag. A*, 44 (1981) 601.
13. C. Herring, *The Physics of Powder Metallurgy*, editado por W.E. Kingston, McGraw-Hill, New York (1951) p. 143.
14. R. Raj, *Met. Trans. A*, 6A (1975) 1499.
15. C. Herring, *J. Appl. Phys.*, 21 (1950) 437.
16. L. Martínez y W.D. Nix, *Met. Trans. A*, 12A (1981) 23.