

Logros y expectativas de la Mecánica de la Fractura

POR M. ELICES CALAFAT

Recibido: 11 de marzo de 1987

Presentado por el Académico Numerario D.Felipe Calvo

¿Qué pueden tener en común tres estructuras tan diferentes como la cúpula de San Pedro en el Vaticano, los barcos de la serie Liberty de la Segunda Guerra Mundial y un implante de cabeza del fémur de acero inoxidable? La respuesta es: *grietas*.

Cuando Giacomo della Porta y Domenico Fontana construyeron la cúpula de San Pedro, en 1590, poco podían imaginar que dos siglos más tarde el arquitecto Poleni recibiría un encargo del Papa, Benedicto XIV, para que estudiase el alarmante crecimiento de las *grietas* del tambor y remediase la situación. Otros dos siglos después, en una inspección realizada en 1946, se detectó que el 20% de los barcos mercantes construidos –unos 5.000– durante la Segunda Guerra Mundial tenían *grietas* de un tamaño considerable. Entre 1942 y 1952 más de 200 barcos registraron roturas clasificadas como “serias” y, por lo menos, nueve barcasas del tipo T-2 y siete barcos del tipo Liberty se partieron por la mitad como resultado de roturas frágiles.

Estudios recientes sobre la durabilidad de los implantes de cabeza de fémur indican que alrededor del 1% fracasan por fractura del metal en la región intermedia. Un análisis de estas roturas mostró que se habían producido por crecimiento lento de *grietas* originadas en la superficie del metal debido al efecto combinado de un diseño inadecuado, esfuerzos no previstos y un material no compatible con el medio.

En los tres ejemplos mencionados las *grietas* fueron la causa de importantes pérdidas: miles de millones de libras se han gastado en reparaciones de la cúpula, millones de dólares en reparar los barcos y una cifra difícil de evaluar en relación con los implantes donde, además, debe considerarse la repercusión psicológica en el paciente.

El estudio del origen, la estabilidad y la propagación de las *grietas* en un sólido es la finalidad de la Mecánica de la Fractura. Esta disciplina, que hoy ya tiene un lugar reconocido entre las otras ramas del saber, empezó a estructurarse en la década de los años 50 impulsada, en gran medida, por la construcción naval. Veinte años más tarde ya había alcanzado su madurez y prueba de ello es que sus métodos ya figuran en los códigos más avanzados para el proyecto de estructuras metálicas.

El propósito de este trabajo no es resumir el panorama actual de la Mecánica de la Fractura, no sería posible en el espacio disponible para un artículo. En 1968, en un intento enciclopédico para mostrar el estado de la nueva ciencia, se llenaron siete volúmenes (Liebowitz, 1968). Hoy, si alguien lo intentara, harían falta muchos más.

Sólo se pretende mostrar algunos aspectos de la Mecánica de la Fractura; la riqueza de matices de una ciencia que se difunde entre la Física, la Química, las Matemáticas, la Metalurgia o la Biología. Bosquejar líneas de trabajo prometedoras, problemas abiertos y lagunas por vadear.

En la primera parte se contempla el panorama desde un punto de vista *macroscópico* utilizando como herramientas la mecánica de los medios continuos y la termodinámica clásica. Cuando aparecen procesos irreversibles, como la deformación plástica, o inestabilidades, como la localización de las microfisuras, el problema se complica considerablemente.

La Mecánica de la Fractura se observa después desde un punto de vista *microscópico*. Se mencionan los dos micromecanismos básicos responsables de las roturas en los materiales; el clivaje y la nucleación, crecimiento y coalescencia de cavidades. Para ilustrar el espíritu de este apartado se comenta el micromecanismo que ha permitido incrementar la tenacidad de fractura en un material cerámico que tiene un futuro prometedor, el óxido de circonio.

Finalmente, se hace un recorrido por las fronteras de la Micromecánica de la Fractura. En un extremo, en contacto con la mecánica de medios continuos, se comentan los materiales “numéricos” –una nueva forma de investigar el comportamiento de los materiales que se ha hecho posible gracias a los potentes ordenadores–. En el otro extremo, ya en los dominios de la Mecánica Cuántica, se presentan los intentos por comprender la fragilización inducida por impurezas y se contempla el proceso íntimo de la rotura como un fenómeno de localización electrónica.

PLANTEAMIENTO MACROSCÓPICO: LA MECÁNICA DE LA FRACTURA

Las herramientas necesarias para resolver los problemas indicados en la introducción se han extraído de la mecánica de medios continuos y de la termodinámica clásica. Desde este planteamiento de la fractura –macroscópico y continuo– se supone que en el sólido existen fisuras macroscópicas que pueden actuar como núcleos de la fractura y que el medio es continuo y homogéneo, en el sentido de que el tamaño de las fisuras es grande en comparación con las dimensiones características de la microestructura del material. En estas circunstancias el problema se centra en estudiar cómo influyen en la fractura del sólido las cargas aplicadas, la geometría de la fisura y las condiciones ambientales. A este campo de conocimientos se le conoce, desde hace tres décadas, como el campo de la *Mecánica de la Fractura*. Paralelamente se han desarrollado teorías para explicar los procesos microscópicos de la fractura en distintos materiales y bajo diversas condiciones y a esta parcela del conocimiento, menos desarrollada que la anterior, se la

suele conocer como *Física de la Fractura*. En esta sección se comentan algunos logros y limitaciones de la Mecánica de la Fractura, dejando para la siguiente los aspectos microestructurales de la fractura.

La forma más simple de abordar el problema –la aproximación de primer orden– consiste en suponer que el material tiene un comportamiento elástico y lineal. Aun así, el cálculo del campo de tensiones alrededor de una fisura –dato esencial para estudiar el fenómeno de la fractura– ha costado mucho resolverlo. Hubo que esperar hasta bien entrado este siglo para plantear correctamente el problema y desarrollar técnicas adecuadas para su solución. Muskhelishvili (1942), para dos dimensiones, lo planteó como un problema de Hilbert. Es decir, la solución del problema elástico plano se puede reducir al cálculo de una función seccionalmente analítica $F(z)$ definida en todo el plano, cortado por un conjunto finito de arcos, con un polo de orden k en el infinito y que satisfaga a la condición de contorno,

$$F^+(t) - \xi F^-(t) = f(t) \quad (1)$$

para todos los puntos t del contorno, en la que ξ es una constante y la función $f(t)$ definida sobre el contorno satisface a la condición de Holder. El problema se resuelve laboriosamente de forma aproximada porque se dispone de muy pocas soluciones analíticas. Solamente en estos últimos años ha sido posible disponer de soluciones para las geometrías más usuales, gracias a los cálculos por ordenador.

Otra aportación, en los años 50 y decisiva para el desarrollo de la Mecánica de la Fractura, nació del estudio de las expresiones asintóticas del campo tensional alrededor del fondo de una fisura. Irwin (1958) detectó que la estructura del campo de tensiones en las proximidades de una fisura era siempre la misma, con independencia del tipo de sollicitación y geometría del sólido fisurado. El primer término del desarrollo asintótico del campo tensional, tomando como origen el fondo de la fisura, viene dado por (ver, por ejemplo, Elices, 1984),

$$\sigma_{ij} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}(\theta) + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} g_{ij}(\theta) \quad (2)$$

donde $f_{ij}(\theta)$ y $g_{ij}(\theta)$ son funciones universales de θ , y K_I y K_{II} , los factores de intensidad de tensiones –que dependen de la geometría del sólido, del estado tensional remoto y de la longitud de la fisura–. Las características específicas de cada fisura están englobadas en los factores de intensidad de tensiones K_I y K_{II} . Una vez conocidos estos, la estructura del campo es siempre la misma para cualquier sólido plano fisurado. La singularidad del tipo $r^{1/2}$ es debida a la aproximación elástica lineal. Para materiales elásticos no lineales, con un exponente n , por ejemplo, la singularidad sería del tipo $r^{-1/(1+n)}$.

Cuando se conoce la solución elástica, los factores de intensidad de tensiones puede calcularse a partir de expresiones del tipo:

$$\begin{aligned} K_I &= \lim_{r \rightarrow 0} \left[(2\pi r)^{1/2} \sigma_{\theta\theta}(r, 0) \right] \\ K_{II} &= \lim_{r \rightarrow 0} \left[(2\pi r)^{1/2} \sigma_{r\theta}(r, 0) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

o bien a partir de expresiones similares si lo que se tiene es una solución en desplazamientos. Los factores de intensidad de tensiones representan una medida del campo tensional en la singularidad del fondo de la fisura. La forma general de estos factores de intensidad de tensiones es,

$$K = C \sigma \sqrt{\pi a} \quad (4)$$

donde σ es la tensión lejos de la fisura, a la longitud de la fisura y C un factor que depende de la geometría del sólido fisurado. Estos factores también admiten una interpretación cinemática, cuando se escriben en función de los desplazamientos, porque representan la discontinuidad en los desplazamientos en puntos del interior de la fisura muy próximos al fondo de la misma.

Una vez establecidos estos conceptos el camino hacia un criterio de fractura estaba claro. Puesto que el factor de intensidad de tensiones caracteriza completamente el campo tensional alrededor del fondo de la fisura, si se puede medir dicho factor en el instante de la rotura –valor crítico que llamaremos K_C –, cabe esperar que en otras circunstancias –el mismo material pero con una geometría fisurada distinta y solicitado de otra forma– también rompa cuando el nuevo factor de intensidad de tensiones K alcance el mismo valor crítico K_C –que se llama *tenacidad de fractura* del material–. Este criterio puede escribirse simplemente así:

$$K(\text{geometría, fuerzas}) = K_C(\text{material}) \quad (5)$$

la función de la izquierda se *calcula*, mientras que la función de la derecha es una propiedad del material que se *mide* en el laboratorio (ver, por ejemplo, Elices 1985a). Desde los años 60 han proliferado las técnicas para calcular K , por procedimientos rápidos y a la vez suficientemente aproximados, para las situaciones de mayor interés ingenieril y por otra parte se han desarrollado procedimientos de ensayo, que han sido normalizados, para medir K_C .

Este planteamiento se apoya, en esencia, en dos hipótesis: en la existencia de una región autónoma alrededor del fondo de las fisuras que puede caracterizarse mediante un solo parámetro –el factor (o los factores) de intensidad de tensiones– y en el supuesto de que la tenacidad de fractura – K_C – es una propiedad del material. En la realidad, las dos hipótesis se cumplen sólo de forma aproximada pero gracias a la teoría basada en ellas hoy viajamos en aviones más seguros, podemos construir en situaciones ambientales que antes eran impensables y utilizar una variedad de productos con una fiabilidad razonable. Aun así, quedan muchos problemas por resolver, veamos algunos ejemplos:

Cuando la propagación de las fisuras va asociada a la plastificación del material, la hipótesis de autonomía puede invalidarse. Es decir, si alrededor

del fondo de la fisura se genera una zona plastificada que se extiende más allá de la región dominada por el primer término del desarrollo asintótico (2), ya no se podrá caracterizar el estado tensional mediante el factor de intensidad de tensiones y el criterio de rotura establecido no tendrá validez. No se ha encontrado hasta la fecha un criterio sencillo, análogo al (5), aplicable a situaciones elastoplásticas a pesar del enorme esfuerzo invertido en esta dirección, financiado en gran parte por las compañías nucleares (véase, por ejemplo, NUREG/CP-0051, 1983 y la sección XI del código ASME, o Elices 1985b). Estas dificultades han generado actividades en dos direcciones; por un lado, el desarrollo de técnicas de fuerza bruta para resolver el problema particular que se presentaba en cada caso, así se han obtenido soluciones aproximadas de dudosa generalización a otros problemas elastoplásticos. En otra dirección, se han estimulado estudios teóricos que si bien todavía no han resuelto el problema de una manera satisfactoria han puesto de manifiesto aspectos esenciales, uno de ellos ha sido la paradoja de Rice (Nguyen, 1981):

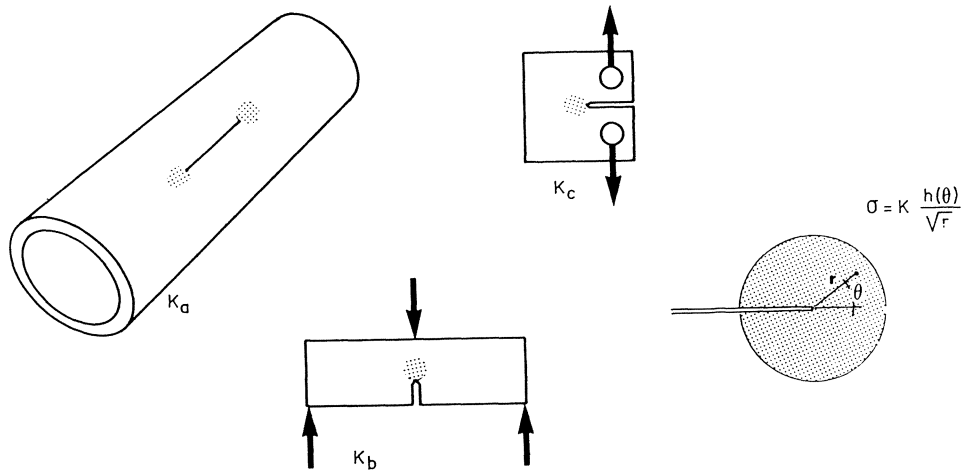


Figura 1. Región autónoma en el fondo de las fisuras.

La aproximación elástica predice tensiones infinitas en el fondo de la fisura pero, en realidad, las tensiones están acotadas. Imponer esta condición equivale a definir una región junto a la fisura –zona deteriorada o zona de transformación– donde el material experimenta una gran deformación. En cierta forma, se trata de un modelo parecido al de la capa límite utilizado para los fluidos viscosos. La aproximación elástica ignora la existencia de la zona deteriorada. Si también se ignora para un material rígido plástico su endurecimiento por deformación (el modelo más simple de un sólido plastificable) resulta que toda la energía disponible para rasgar la fisura se invierte

en plastificarla, o dicho de otra forma, la fisura no puede propagarse porque toda la energía se disipa en trabajo plástico. Esta situación es parecida a la paradoja de d'Alembert; la resistencia al avance de un cuerpo sumergido en un flujo estacionario e irrotacional de un fluido no viscoso, es nula, porque el número de Reynolds es infinito. En la Mecánica de Fractura elastoplástica, con un material rígido plástico sin endurecimiento por deformación, la situación es parecida ya que la deformación en rotura no está acotada y puede tomar cualquier valor. La analogía puede continuar y al desaparecer la paradoja se puede comparar la región deteriorada a la estela que se forma en un fluido viscoso, pero aquí nos conformamos con indicar que la introducción de una zona de deterioro en los modelos de fractura es muy prometedora para modelizar la fractura en materiales elastoplásticos y cerámicos.

Otra situación, donde tampoco puede despreciarse la región deteriorada, es cuando se estudia la propagación de fisuras en materiales pétreos y, en particular, en hormigones. En determinadas circunstancias estos materiales presentan en las curvas carga-desplazamiento una rama descendente después de haber alcanzado un máximo, comportamiento conocido como *ablandamiento por deformación*. Este fenómeno se puede explicar con la presencia de una zona deteriorada donde el material todavía no está totalmente agotado y es capaz de soportar cierta carga a medida que sigue deformándose. Este comportamiento plantea, entre otras, dos dificultades; una, de tipo conceptual, sobre el significado físico del ablandamiento por deformación, y otra, de tipo matemático, relacionada con un problema de inestabilidad cuando la región deteriorada se localiza y genera una fisura.

Posiblemente el ablandamiento por deformación no sea una propiedad constitutiva de un material y no tenga sentido hablar de este fenómeno cuando se analiza, con suficiente resolución, un material heterogéneo. En algunos casos, este comportamiento macroscópico se puede explicar sin recurrir al ablandamiento si se produce una deformación no homogénea. Situaciones parecidas se dan en otros campos de la Física: Una isoterma en un gas de van der Waals, por ejemplo, puede exhibir una región de "ablandamiento" cuando la presión disminuye al disminuir el volumen. En astrofísica también se contempla una ecuación de estado que exhibe un "ablandamiento volumétrico", cuando se explica el colapso gravitacional de las estrellas. La posibilidad de que el material pueda ablandarse por deformación y que este fenómeno pueda localizarse son dos procesos en los que se basan las teorías de fractura del hormigón.

La necesidad de resolver problemas prácticos ha impulsado numerosos cálculos, basados en elementos finitos, donde se ha considerado el ablandamiento del material. Los resultados muestran que las regiones con ablandamiento pueden localizarse –de hecho éste es el origen de las grietas– y que esta localización depende del tamaño y tipo de la malla elegida. Es claro que esta situación no es aceptable y que hace falta resolver el problema del ablandamiento y su localización. En esta dirección se está dedicando un esfuerzo considerable y la línea de trabajo más prometedora parece ser que está basada en teorías no locales, donde la tensión en un punto no sólo

depende de la deformación en este punto, sino también del gradiente de la deformación (Aifantis, 1984).

PLANTEAMIENTO MICROSCOPICO: LA FISICA DE LA FRACTURA

El criterio de fractura comentado anteriormente, $K = K_C$, está basado en el principio de conservación de la energía y no contiene indicación alguna sobre los mecanismos microscópicos causantes de la rotura. El valor crítico del factor de intensidad de tensiones es un parámetro macroscópico obtenido mediante ensayos y es deseable poderlo deducir a partir de las características microestructurales de cada material. Esta información permitiría *predecir* su comportamiento al variar parámetros que suelen mantenerse constantes en los ensayos normalizados, como pueden ser la temperatura o la velocidad de sollicitación y *diseñar* nuevos materiales con valores prefijados de la tenacidad de fractura.

En *materiales cristalinos* los micromecanismos responsables de la fractura son, en esencia, dos: el clivaje, debido a la descohesión de los planos cristalinos y la nucleación, crecimiento y coalescencia de cavidades (ver, por ejemplo, Elices, 1986). El primero está asociado a las roturas frágiles y el segundo a las roturas intrínsecamente dúctiles.

Las roturas por *clivaje* se originan en regiones donde el deslizamiento de los planos cristalinos está impedido, como en las fronteras de grano o de macla, en las inclusiones o en otro tipo de defectos. Por este motivo, sólo los metales de estructura hexagonal compacta o cúbica centrada exhiben roturas por clivaje. Los cúbicos centrados en las caras, que pueden movilizar con facilidad cinco sistemas de deslizamiento independientes, no muestran esta forma de rotura.

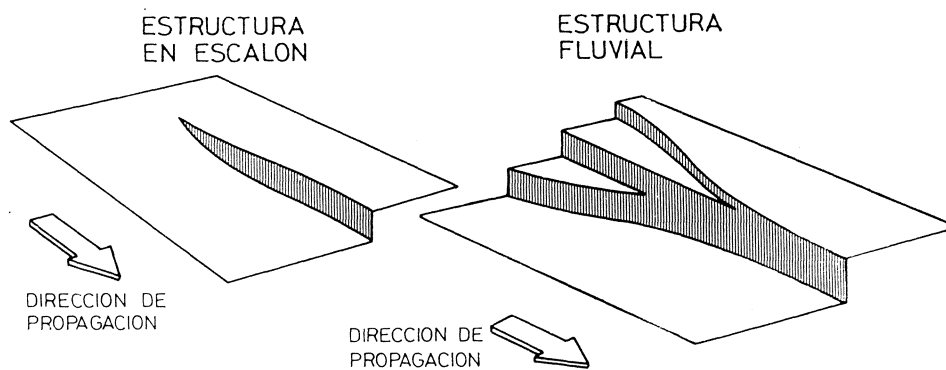


Figura 2. Algunos aspectos característicos de las roturas por clivaje.

Al observar, mediante un microscopio electrónico, las facetas debidas al clivaje aparecen algunos aspectos característicos de este fenómeno; los escalones, las estructuras fluviales o las espinas de pez. Un escalón de clivaje es

la zona de unión entre dos planos de clivaje, cuando la fisura se propaga en dos planos paralelos. La unión se consigue por deslizamiento o por clivaje secundario en otra familia de planos. En general, los escalones de clivaje son paralelos a la dirección de propagación de la fisura. Cuando varios escalones se unen se forman estructuras que recuerdan la topografía de un río y sus afluentes y, por este motivo, se les suele llamar estructuras fluviales.

La dirección de propagación de la fisura coincide con la de la corriente en el "río", lo que permite identificar en las microfotografías las direcciones en que se propaga localmente una fisura. Estas estructuras se observan con más frecuencia en las fracturas producidas cerca de la temperatura de transición dúctil-frágil, porque la formación de escalones por deformación plástica requiere un aporte adicional de energía.

Los microscopios electrónicos de barrido disponibles no pueden resolver la estructura fina de las facetas de clivaje, ya que los escalones más pequeños deben ser del tamaño del vector de Burgers de las dislocaciones helicoidales que atraviesen el plano de clivaje. En consecuencia, todavía no se han podido observar los detalles de la microplasticidad que se cree, están siempre ligados a la iniciación y propagación de fisuras por clivaje. Pero las dificultades en la interpretación de estas roturas no están ligadas sólo al poder de resolución de los microscopios, (unos 5 nm para los de barrido), la complejidad de las estructuras que se observan no ha permitido su clasificación de una forma simple e inambigua. En particular, las fracturas en aceros de alta resistencia, que han sido templados y revenidos y que contienen una gran densidad de pequeños carburos, muestran una microestructura de clivaje compleja, (llamada en inglés "quasi-cleavage"). Las superficies de fractura están formadas por pequeñas zonas de clivaje que han crecido alrededor de una microcavidad. El tamaño de estas facetas está limitado por el tamaño de las placas de martensita y entre ellas hay pequeñas regiones, donde el material parece desgarrado, formadas por fusión de microcavidades, como se comenta en el siguiente párrafo. Estos aceros muestran superficies de fractura todavía más complejas y aún no interpretadas, (llamadas en inglés TTS Tearing Topography Surfaces), cuando rompen por fragilización por hidrógeno junto con una tensión hidrostática importante (Toribio y Elices, 1987).

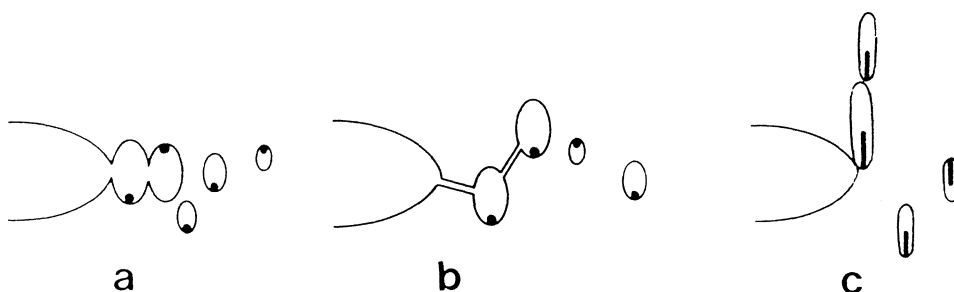


Figura 3. Diversas formas de coalescencia de cavidades.

Otro proceso de rotura, a nivel microscópico, es por *formación, crecimiento y coalescencia de microcavidades*. Las partículas de fases secundarias están íntimamente asociadas a este tipo de rotura; las microcavidades se forman por despegue en las interfases entre la matriz y las partículas, crecen por deformación plástica y se unen al desgarrarse los ligamentos entre ellas. Aunque desde los años 50 se conocen estos mecanismos, la descripción cuantitativa sólo se ha abordado con éxito recientemente cuando las herramientas basadas en plasticidad de medios continuos y en la mecánica de las dislocaciones han estado suficientemente perfeccionadas para tratar la nucleación de cavidades en las interfases partícula-matriz, (por ejemplo Goods y Brown, 1979, Bundiansky, Hutchinson y Slutsky, 1981). El problema de la coalescencia de cavidades puede tratarse modelizando el comportamiento de una cavidad, y estudiando la interacción con otras, (por ejemplo Thomason, 1981), o considerando todo el material como un conjunto poroso, donde la localización de la rotura se trata como un problema de bifurcación en un campo homogéneo de deformaciones (Gurson, 1977).

Un ejemplo de interpretación microscópica del mecanismo de fractura y del aprovechamiento de este conocimiento para la mejora de las propiedades de un material, nos lo ofrecen los materiales cerámicos endurecidos por un cambio de fase inducido por tensión.

Desde hace tiempo se tiene la sospecha de que los materiales cerámicos pueden desempeñar un papel importante en el mundo de los materiales estructurales porque poseen una gran resistencia a la corrosión y a la abrasión y, lo que es más importante, una temperatura de fusión muy alta que les permite mantener sus propiedades mecánicas hasta temperaturas cercanas a las de fusión de aceros y aleaciones comerciales. Por este motivo se contemplan los materiales cerámicos como los materiales que sustituirán, en un futuro, los metales en los motores térmicos, ya que podrán trabajar a temperaturas más altas y, en consecuencia, aumentar el rendimiento. La realidad, hoy, es que el uso de materiales cerámicos para fines estructurales está restringido porque son muy frágiles. En estos materiales la tenacidad de fractura es baja, (menor de $10 \text{ MPa m}^{1/2}$) y por lo tanto ofrecen poca resistencia a la propagación de fisuras, lo que conduce a roturas bruscas, con muy poca deformación, y sin previo aviso.

En los metales, la fractura va acompañada de deformación plástica y una forma de aumentar la tenacidad de fractura, K_C se consigue favoreciendo esta deformación. Como los materiales cerámicos apenas se deforman a temperatura ambiente, para aumentar su tenacidad de fractura, será preciso buscar otros mecanismos que absorban energía durante la propagación de las fisuras. Ya se conocen varios mecanismos capaces de conseguirlo; reforzándolos con fibras, favoreciendo la microfisuración, o induciendo un cambio de fase.

El endurecimiento por cambio de fase se produce en aquellos materiales capaces de realizar una transformación de tipo martensítico (por analogía con los metales) inducida por un estado tensional adecuado. Este proceso de absorción de energía es equivalente a una deformación plástica, un cambio de forma en respuesta a una carga aplicada. En los materiales cerámicos a

base de circonia (ZrO_2) este cambio de fase se puede producir cuando la circonia pasa de tetragonal a monoclinica, produciéndose un incremento de volumen de un 3% aproximadamente. Concretamente, los granos de ZrO_2 –con una estructura tetragonal metastable– situados en el fondo de una fisura experimentan a medida que la fisura avanza un cambio de fase –de tetragonal a monoclinica–, inducido por el campo tensional que rodea el fondo de la fisura (McMeeking y Evans, 1982). La energía requerida para esta transformación se traduce en un aumento de la tenacidad de fractura del material cerámico. Además, una vez que la fisura ha pasado se produce una compresión en los labios de la fisura, debido al aumento de volumen de las partículas transformadas, que dificulta la progresión de la grieta.

El incremento de la tenacidad de fractura, ΔK_C , debido a este proceso viene dado por (Ruf y Evans, 1983).

$$\Delta K_C \approx f V E r^{1/2} \quad (6)$$

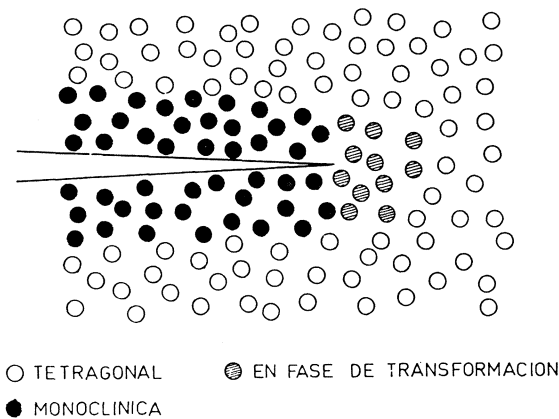


Figura 4. Aumento de la tenacidad de fractura por un cambio de fase inducido por el estado tensional.

donde f es el porcentaje de ZrO_2 tetragonal capaz de transformarse, V es la deformación volumétrica debida a transformación martensítica, E el módulo de elasticidad de la matriz, y r el espesor de zona de transformación que es una delgada película que tapiza las paredes de la fisura, como si fuera la estela. Las dos variables donde se puede actuar para aumentar la tenacidad de fractura son f y E :

f puede aumentar al optimizar el porcentaje de circonia tetragonal metastable mediante una juiciosa distribución de tamaños pequeños conseguida, por ejemplo, con reacciones de precipitación en estado sólido a partir de circonia parcialmente estabilizada.

E puede incrementarse eligiendo una matriz apropiada, por ejemplo alúmina, Al_2O_3 , ($E \approx 390 \text{ GPa}$) en vez de circonia, ($E \approx 200 \text{ GPa}$).

El espesor de la zona de transformación depende de f y se ha medido utilizando técnicas sofisticadas, espectroscopía Raman y rayos X . Los valores obtenidos para circonias de varios tipos están entre 1 y 4 μm , lo que permite conocer el número de partículas implicadas en este proceso cuando se conoce su tamaño, (que puede variar entre la micra y la centésima de micra). Este dato es importante para el diseño de materiales cerámicos tenaces porque, en general, al utilizar matrices extrañas para aumentar el módulo de elasticidad es a costa de un mayor tamaño de la partícula metastable.

FRONTERAS DE LA MICROMECHANICA DE LA FRACTURA

La utilización de la mecánica de medios continuos para interpretar el fenómeno de la fractura tiene sus limitaciones, como se ha bosquejado al principio, cuando se pretende conocer la naturaleza física de los parámetros más característicos; la tenacidad de fractura K_{IC} , el módulo de elasticidad E , o el límite de cedencia σ_C entre otros. Parece claro que será con la ayuda de la micromecánica de la fractura cuando se consiga este objetivo aunque todavía queda mucho camino por recorrer, como se puede intuir de la sección anterior. Para terminar, se comentan – brevemente – dos líneas de investigación situadas en las fronteras de la micromecánica; una en la región donde se une con la mecánica de los medios continuos y otra, en el otro extremo, donde ya es preciso utilizar la mecánica cuántica.

Con el planteamiento microscópico el material se modeliza como un agregado celular en el que cada celda contiene un mecanismo de microseparación. Cuando el mecanismo predominante es la separación a nivel atómico, el elemento estructural es la celda, unidad de la red cristalina o de la estructura considerada. Cuando se trata de un mecanismo basado en el crecimiento de cavidades, cada celda contiene una inclusión. Si la fractura es preponderantemente por clivaje el tamaño de las celdas suele corresponder con el grano cristalino o con el de una colonia si se trata, por ejemplo, de perlita. En otras circunstancias la celda puede ser mayor, como veremos a continuación con el hormigón.

La disponibilidad de ordenadores potentes ha permitido abordar problemas por procedimientos nuevos. Hasta hace poco, sólo se contemplaban dos formas de estudiar el comportamiento mecánico del hormigón; experimentalmente, mediante ensayos en el laboratorio y, analíticamente, con papel y lápiz. Desde hace unos años se ha introducido una tercera vía, el “hormigón numérico”, (Roelfstra y Sadouki, 1986 y referencias citadas en el trabajo) basado en reproducir numéricamente el comportamiento de una celda unidad de hormigón lo suficientemente pequeña para que sea tratable con los ordenadores disponibles y lo suficientemente grande para que sea representativa del comportamiento global del hormigón. En el artículo citado, el lado de la celda es de 50 mm y contiene tres áridos.

Este es un ejemplo situado entre la micromecánica y la mecánica de los medios continuos y, previsiblemente, este tipo de “materiales numéricos”

tendrán bastante protagonismo en las próximas décadas aunque, por ahora, su alcance esté limitado por la capacidad de los ordenadores. Por este motivo, en la referencia citada, los autores se restringen a dos dimensiones pero proyectan trabajar en tres tan pronto como puedan. Las aproximaciones utilizadas en este primer modelo son groseras y, aun así, llegan a resultados con bastante sentido físico aunque no sea posible, todavía, abordar el problema de las grietas en la cúpula de San Pedro.

Se supone que el componente más débil, donde se inician las fisuras, es la interfase entre el árido y la matriz, (que los autores llaman “aureola de transición”), y la modelizan como un sólido viscoplástico con criterios de rotura clásicos, es decir; rompe cuando las tensiones normales superan un valor crítico o bien cuando las tensiones tangenciales superan el criterio de Coulomb. La matriz, el mortero de cemento, también puede fisurarse y los áridos, en este modelo, se supone que no rompen y se comportan como un sólido elástico y lineal, hipótesis admisible para determinado tipo de hormigones.

El cálculo se hace incrementado, por escalones, las fuerzas o los desplazamientos en el contorno. En cada paso se analizan los resultados, se liberan los nudos de las mallas rotas y se reordena la red. Este análisis es penoso y en estos momentos los esfuerzos se dirigen hacia la automatización de esta etapa. Los resultados citados por los autores, para distintas condiciones iniciales, son realistas y reproducen el comportamiento esperado del hormigón en un ensayo de tracción simple.

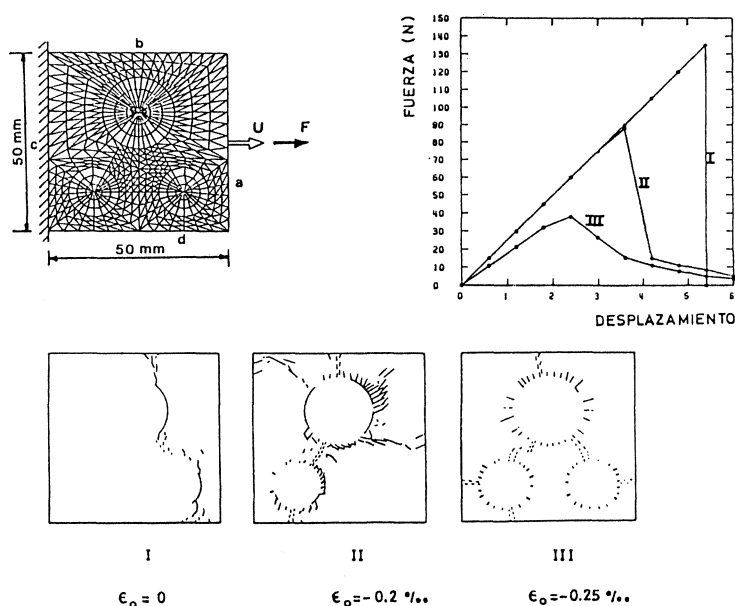


Figura 5. Curvas Fuerza-Desplazamiento para un hormigón “numérico” para distintas condiciones iniciales.

En el otro extremo, ya en los dominios de la mecánica cuántica, también parece ser que la capacidad de los ordenadores es la mayor limitación. Son bien conocidas las tremendas dificultades de cálculo que aparecen cuando se quiere resolver un problema realista. Un cálculo destinado a determinar una configuración atómica, pasa por el cálculo de la energía del sistema y no puede ignorar la energía de los electrones internos. Por otro lado las energías de enlace, que en el fondo nos permiten obtener la configuración de equilibrio, son del orden del eV por átomo, mientras que la energía total puede ser varios órdenes de magnitud superior. En consecuencia, un cálculo preciso de una estructura basado en el cálculo de la energía de los niveles electrónicos, partiendo de primeros principios, puede necesitar una precisión superior a una parte en un millón. Peor aún, los cálculos para determinar la estabilidad de fases, de estructuras superficiales o de energías de fractura requieren una precisión todavía mayor, porque la diferencia entre las energías de las soluciones es una fracción de la energía de cohesión.

Actualmente, hay razones para dudar de que pueda conseguirse esta precisión cuando los cálculos se basan en una cadena sucesiva de aproximaciones; primero la de Born–Oppenheimer, después la de un solo electron, la del funcional basado en la densidad local, luego la decisión entre un cálculo usando teoría de bandas o con un grupo (“cluster”) de átomos y otras más que se van añadiendo para que el problema sea “tratable”. Por este motivo se están buscando otros puntos de vista que permitan extraer la información necesaria para dar respuestas a estos problemas sin necesidad de calcular los niveles energéticos ab initio. Un ejemplo, en esta dirección, es la utilización de los diagramas de densidad de estados por encima del nivel de Fermi para aclarar aspectos de las roturas por corrosión bajo tensión. En este caso la información requerida no es tan sensible a las hipótesis mencionadas como el cálculo de los niveles energéticos.

Este tipo de roturas – como las de las prótesis de cadera – se producen por la acción sinérgica de un estado tensional y un ambiente agresivo específico (Elices, 1985, 1986). En materiales metálicos suelen ser intercrystalinas y con frecuencia atribuidas a la precipitación de impurezas en los bordes de grano. Dos grupos de investigadores, encabezados por Messmer y Eberhart (ver Briant y Messmer, 1984 y Eberhart y otros, 1985 y las referencias que ellos citan), han estudiado el problema de la fragilización del níquel en presencia de azufre y otros elementos contaminantes.

Messmer comparó la estructura electrónica de un grupo de ocho átomos de níquel con la del mismo grupo introduciendo en el centro un átomo de azufre. La técnica seguida fue la de $SCF - X\alpha - SW$ debida a Slater. La densidad de carga electrónica, calculada de una forma restrictiva, (ver Eberhart), mostraba un aumento en los alrededores del átomo de azufre a expensas de los enlaces entre los átomos de níquel. Este refuerzo de las uniones azufre–níquel en dirección perpendicular se interpretó como una pérdida de cohesión en los bordes de grano contaminados por azufre y, en consecuencia, como una justificación de la corrosión bajo tensión.

Más tarde, Eberhart y sus colaboradores mostraron que los cálculos de Messmer quedaban restringidos a situaciones donde el azufre estaba muy

diluido. En la práctica, cuando se detecta fragilización se observa una cantidad de azufre adsorbido equivalente a un porcentaje importante de una monocapa y el azufre precipitado en los bordes de grano debe modelizarse incluyendo varios átomos, y no uno sólo, dentro del grupo de átomos de níquel. Cálculos posteriores de Eberhart, combinando resultados a partir de un cálculo de bandas y otro con un grupo de átomos, parecen indicar que la fractura puede ser el resultado de un aumento de la movilidad de la carga electrónica.

La fractura se interpreta en este modelo como un desgarre localizado en una región de unos pocos angstroms de anchura. Se basa en la observación de que en materiales con rotura intergranular, como el Ni_3Al , presentan una distribución muy distinta en la densidad de estados por encima del nivel de Fermi cuando se hace un cálculo de bandas (que reproduce una situación en el interior del grano) o un cálculo a partir de un "cluster" (que puede representar una situación en la frontera de un grano). Los cálculos a partir de "clusters" exhiben una alta densidad y baja los que provienen de una estructura de bandas. Eberhart interpreta este resultado sugiriendo que al deformar el policristal, la respuesta electrónica será mayor en los bordes de grano que dentro de ellos y que, además, la densidad de estados se localizará a medida que aumenta la deformación. En apoyo de esta idea está el siguiente resultado: Cuando se calcula la densidad de estados en presencia de elementos que reducen la fragilización, como el boro por ejemplo, se observa que las diferencias entre el cálculo de bandas y el del "cluster" disminuyen.

Eberhart concreta más esta suposición y argumenta que "como en los metales la transmisión del calor es 100 veces más eficiente mediante electrones que a través de fonones, durante una deformación que localice mucho la densidad de estados tendrá que producirse un fuerte calentamiento en esta región, suficiente para evaporarla, provocando en consecuencia la rotura" y añade que este modelo es más realista que el clásico de la rotura de los enlaces.

Con independencia de la bondad de este modelo, este último ejemplo nos ha llevado a plantearnos el problema de la fractura desde una perspectiva totalmente nueva. En vez de pensar en una solución mecánica para aumentar la tenacidad del material, como en el caso de las cerámicas reforzadas, se nos ofrece un camino electrónico. ¿Quién sabe si no será posible diseñar materiales más tenaces manipulando la densidad de estados electrónicos por encima del nivel de Fermi? Las técnicas para conseguirlo ya se utilizan en el diseño de materiales semiconductores pero parece lejano –por no decir utópico– el día en que se puedan resolver los problemas de las fisuras en la Cúpula de San Pedro o en la industria naval actuando sobre la densidad de estados electrónicos del material. No obstante, el problema de las roturas por corrosión-fatiga en materiales para implantes no parece –quizás por nuestra mayor ignorancia– tan lejos de admitir un tratamiento electrónico.

REFERENCIAS

- [1] AIFANTIS, E. C.: *On the Microstructural Origin of Certain Inelastic Models* J. Eng. Materials Tech., Vol. 106, pp. 326-330 (1984).
- [2] ASME: *Boiler and Pressure Vessel Code*. Sección XI (1983, Summer Addenda).
- [3] BRIANT, C. L., MESSMER, R. P.: *An electronic model for the grain boundary embrittlement of iron, nickel and chromium and their alloys by antimony* Acta Metall., Vol. 32, No. 11, pp. 2043-2052 (1984).
- [4] BUDIANSKY, B., HUTCHINSON, J. W., SLUTSKY, S.: *Void growth and collapse in viscous solids*. En Mechanics of Solids, Oxford, Pergamon Press (1981).
- [5] CEDOLIN, L. *Sulla applicabilità della Meccanica della Frattura al Calcestruzzo*. En Sandro dei Poli, 70 Aniversario, Politecnico de Milano, pp. 181-194 (1985).
- [6] EBERHART, M. E., LATANISION, R. M., JOHNSON, K. H.: *The chemistry of fracture: A basis for analysis* Acta Metall., Vol. 3, No. 10, pp. 1769-1783 (1985).
- [7] ELICES, M.: *Mecánica de la Fractura: Aspectos Matemáticos*. Publicaciones de la E.T.S. Ingenieros de Caminos (1984).
- [8] ELICES, M.: *Mecánica de la Fractura: Aspectos Ingenieriles*. Publicaciones de la E.T.S. Ingenieros de Caminos (1985a).
- [9] ELICES, M.: *Fracture of Steels for Reinforcing and Prestressing Concrete*. En Fracture Mechanics of Concrete. Martinus Nijhoff Pub (1985b).
- [10] ELICES, M.: *Mecánica de la Fractura: Aspectos Físicos* Publicaciones de la E.T.S. Ingenieros de Caminos (1986).
- [11] GOODS, S. H., BROWN, L. M.: *The nucleation of cavities by plastic deformation*. Acta Metall., Vol. 27, pp. 1-15 (1979).
- [12] GURSON, A. L.: *Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth*. Trans. ASME, Vol. 99, pp. 2-15 (1977).
- [13] IRWIN, G. R.: *Fractura*. Handbuch der Physik, Vol. II, pp. 551-590, Springer (1958).
- [14] LIEBOWITZ, H.: *Fracture, an Advanced Treatise (Vol. 1 al 7)*. Academic Press, New York (1968).
- [15] MCMEEKING, R. M., EVANS, A. G. *Mechanics of Transformation-Toughening in Brittle Materials* J. Am. Ceram. Soc., Vol. 65, pp. 242-246 (1982).
- [16] MUSKHELISHVILI, N. I.: *Problemas de contorno en la teoría de la elasticidad para un plano con cortes rectos*. Soobshcheniya A.N. Gruz S.S.R., Vol. III, pp. 103-110, (1942).

- [17] NGUYEN, Q. S.: *A thermodynamic description of the running crack problems*. En *Ductile Fracture* S. Nemat-Nasser Ed., IUTAM Proceedings, North Holland (1981).
- [18] NUREG CP-0051 CSNI Specialist meeting on leak-before-break in Nuclear Reactor Piping, (1984).
- [19] ROELFSTRA, P. E., SADOUKI, H.: *Fracture process in numerical concrete en Fracture Toughness and Fracture Energy of Concrete* F.H. Wittmann, Ed.), Elsevier (1986).
- [20] RUF, H., EVANS, A. G.: *Toughening by Monoclinic Zirconia*. J. Am. Ceram. Soc., Vol. 66, pp. 328-332 (1983).
- [21] THOMASON, P. T.: *Ductile fracture and the stability of incompressible plasticity in the presence of microvoids*. Acta Metall., Vol. 29, pp. 763-777 (1981).
- [22] TORIBIO, J., ELICES, M.: *Estudio Cinemático de la fragilización por hidrógeno en alambres entallados*. Anales de Mecánica de la Fractura (1987).