

# Incidencia de los Aglomerados de Defectos Puntuales en el Endurecimiento de Aleaciones Base Fe, Bajo Irradiación

N. SMETNIANSKY DE DE GRANDE

DPTO DE MATERIALES,  
AVDA. DEL LIBERTADOR 8250, 1429 BUENOS AIRES - ARGENTINA  
e-mail: smetnian@cnea.edu.ar

El objetivo del presente trabajo es desarrollar un modelo que permita predecir, cualitativamente, el comportamiento bajo irradiación de aleaciones base Fe. El modelo incluye la aglomeración de defectos puntuales (dp) y asume que la evolución de estos aglomerados con la irradiación es responsable de una parte del endurecimiento inducido por irradiación. Siguiendo los lineamientos de R.E.Stoller<sup>(1)</sup> se considera que los aglomerados de dp se pueden formar en la cascada de irradiación o por encuentros de dp en el proceso de difusión, y la variación de su tamaño se debe a la absorción o emisión de dp. El endurecimiento se calcula suponiendo a los aglomerados como un obstáculo al avance de las dislocaciones. Se estudia una aleación base Fe irradiada con neutrones a 285°C. Los resultados indican que tanto los aglomerados de vacancias como los de intersticiales contribuyen al incremento del endurecimiento bajo irradiación del material.

The goal of the present work is to develop a model to predict under irradiation behavior of iron based alloys. The model includes point defect clustering and assumes that the evolution of these clusters with irradiation give rise to irradiation hardening. Following Stoller<sup>(1)</sup>, it is assumed that clusters can form directly in displacement cascades or by diffusive encounters between free point defects. Cluster sizes depend on the absorption or emission of one point defect. The hardening due to point defect clusters is calculated using a dislocation barrier model. An iron based alloy, irradiated at 285°C is studied. The results show that both vacancy and interstitial clusters enhance hardening under irradiation.

## 1. Introducción

Para modelizar y predecir el comportamiento bajo irradiación de los aceros de los recipientes de presión de los reactores nucleares, es necesario comprender su evolución microestructural. Esta última depende de:

- a) la evolución de la precipitación del Cu bajo irradiación;
- b) la cinética de formación de aglomerados de defectos puntuales.

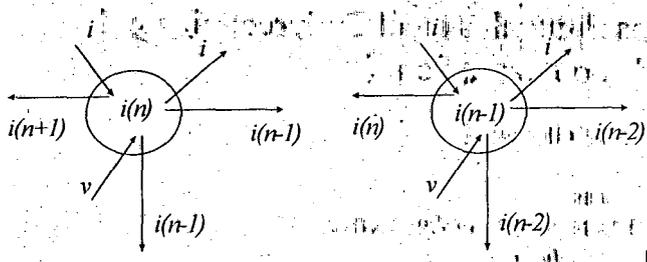
En el presente trabajo se analiza la influencia de los aglomerados de defectos puntuales en la variación de la dureza del material irradiado. La influencia de los precipitados de Cu, estudiada en un trabajo anterior<sup>(2)</sup>, no se incluye en el modelo.

Para estudiar la evolución de las poblaciones de aglomerados con distinta concentración de dp, se utiliza el modelo de balance detallado. Se calcula el número total de aglomerados y

su radio medio y con estos resultados se calcula la variación de la tensión uniaxial debida a la presencia de aglomerados. Para calcular esta tensión se utiliza un modelo tipo Orowan. En las secciones 2 y 3 se detallan los modelos utilizados y en la 4 se analizan los resultados obtenidos.

## 2. Modelo de balance detallado

Se consideran dos tipos de aglomerados: los formados en la cascada de neutrones y los que se generan por encuentros difusivos de defectos puntuales. La información para incluir los primeros se obtiene de trabajos basados en cálculos de dinámica molecular<sup>(3,4)</sup>. Para modelizar los segundos, se asume que crecen y decrecen por agregado o emisión de un único defecto puntual por vez, como ejemplifica el siguiente esquema para aglomerados de  $n$  y  $(n-1)$  intersticiales. Un aglomerado que tiene  $n$



intersticiales y toma un intersticial, pasa a tener  $(n+1)$  y crece; en cambio, si absorbe una vacancia o pierde un intersticial, pasa a tener  $(n-1)$  y decrece.

Las ecuaciones que representan la evolución en el tiempo de los intersticiales y sus aglomerados son de la forma:

$$\frac{dC_i}{dt} = G_i - \alpha_{iv} C_i C_v - D_i C_i S_i^T$$

$$\frac{dC_{2i}}{dt} = \eta G \frac{f_{icl}^2}{2} + \beta_{1i} C_i + (\beta_{3i}^v + \alpha_{3i}^i) C_{3i} - (\alpha_{2i}^i + \beta_{2i}^v + \beta_{2i}^i) C_{2i}$$

$$\frac{dC_{3i}}{dt} = \eta G \frac{f_{icl}^3}{3} + \beta_{2i} C_{2i} + (\beta_{4i}^v + \alpha_{4i}^i) C_{4i} - (\alpha_{3i}^i + \beta_{3i}^v + \beta_{3i}^i) C_{3i}$$

$$\frac{dC_{4i}}{dt} = \eta G \frac{f_{icl}^4}{4} + \beta_{3i} C_{3i} + \beta_{5i} C_{5i} - (\alpha_{4i}^i + \beta_{4i}^v + \beta_{4i}^i) C_{4i}$$

$$\frac{dC_{ni}}{dt} = \beta_{n-1i} C_{n-1i} + \beta_{n+1i} C_{n+1i} - (\beta_{ni}^v + \beta_{ni}^i) C_{ni}$$

con:  $G_i = \eta G (1 - f_{icl})$

$G$  es la velocidad de daño,  $\eta$  la eficiencia de la cascada, y  $f$  la fracción de defectos puntuales aglomerados en la cascada.  $\alpha_{iv}$  es el coeficiente de recombinación y  $S_i^T$  la potencia de atrape de todos los sumideros presentes en el material (dislocaciones, bordes de grano y aglomerados de vacancias e intersticiales).  $\alpha$  y  $\beta$  son los coeficientes de emisión y absorción de defectos puntuales por aglomerados, respectivamente.

Para las vacancias y sus aglomerados las ecuaciones son de la misma forma.

Se estudian aglomerados de hasta 500 intersticiales y 50 vacancias.

Con los valores de concentración de los aglomerados de vacancias o intersticiales se calcula el número total de aglomerados ( $N$ ), el número medio de dp por aglomerado ( $\bar{n}$ ) y el radio medio de los aglomerados ( $\bar{R}$ ), como:

$$N_{i,v} = \sum_{n=2}^{n_{i,v}} C_{i,v}(n)$$

$$\bar{n}_{i,v} = \frac{\sum_{n=2}^{n_{i,v}} n C_{i,v}(n)}{\sum_{n=2}^{n_{i,v}} C_{i,v}(n)}$$

$$\bar{R}_{i,v} = \left( \frac{n_{i,v}}{\pi \sqrt{3}} \right)^{1/2} a$$

siendo  $a$  es el parámetro de red.

### 3. Evolución del endurecimiento

La variación de la tensión de corte, debida a la presencia de los aglomerados, se expresa de la forma:

$$\Delta \tau_K = \frac{G_c b}{\beta \bar{l}}$$

siendo  $G_c$  el módulo de corte del material;  $\bar{l}$  la distancia media entre aglomerados,  $b$  el vector de Burgers y  $\beta$  la altura de la barrera. La dependencia entre la distancia media entre aglo-

merados, el radio medio de los aglomerados y del número total de aglomerados es:

$$\bar{l} = \sqrt{2 \overline{RN}}$$

La relación entre la variación de la tensión uniaxial y la variación de la tensión de fluencia se calcula como<sup>(5)</sup>:

$$\Delta \sigma = 2 \Delta \tau$$

Utilizando los modelos descriptos, se calcula la variación de la tensión uniaxial, debida a la presencia de aglomerados de vacancias e intersticiales.

#### 4. Resultados

Se estudia una aleación base Fe con una densidad de dislocaciones de  $10^9$   $1/\text{cm}^2$ , irradiada con neutrones a una temperatura de  $285^\circ\text{C}$ , y una velocidad de daño de  $2 \times 10^{-9}$  dpa/s. Se calcula la variación de la tensión uniaxial en función de la dosis, considerando sólo la presencia de los aglomerados de dp. En la Figura 1 se representan los resultados obtenidos y los correspondientes resultados experimentales<sup>(6,7)</sup>.

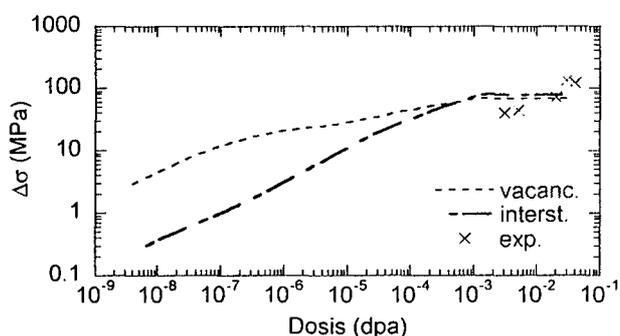


Figura 1 Variación de la tensión uniaxial vs dosis. Las líneas representan resultados del cálculo y los símbolos resultados experimentales.

Pese a que la situación experimental incluye el efecto de aglomerados de vacancias e intersticiales más el efecto de los precipitados de Cu, que no se incluye en el presente cálculo, los resultados del cálculo ajustan bien a los resul-

tados experimentales. Esto se explica porque, de acuerdo a un estudio previo<sup>(2)</sup>, la influencia de los precipitados de Cu sobre la variación de las propiedades mecánicas sólo es importante en las primeras etapas de la irradiación.

#### 5. Conclusiones

Se concluye entonces que, considerando sólo los aglomerados de defectos puntuales se puede predecir cualitativamente el endurecimiento bajo irradiación de una aleación base Fe, a tiempos prolongados de irradiación.

En la próxima etapa de este trabajo se agregará al código el efecto de los precipitados de Cu, previamente estudiado, para tener un modelo válido en todas las etapas de irradiación.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Programa de Modernización Tecnológica-Proyecto Pict-0362 de la ANPCyT.

#### Referencias

1. R.E.Stoller, Effects of Radiation on Mat., 16th Symposium, ASTM STP 1175, 1993, p.394
2. N.Smetniansky-De Grande y A. Barbu. Trans. of the 13<sup>th</sup> Intern. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Tech., Brasil, 13-18 de Agosto, 1995, p. 351
3. T. Díaz de la Rubia y M.W.Guinan, Mater. Sci. Forum, Vol. 97-99, 1992, p.22
4. C.A.English, A.J.E.Foreman, W.J.Pythian, D.J.Bacon y M.L.Jenkins, Mater. Sci. Forum, Vol. 97-99, 1992, p.1
5. G.E. Dieter, Mechanical Metallurgy, Mc Graw-Hill, New York, 1976
6. F.W. Stallman, USNRC Report NUREG/CR-4947 (ORNL/TM-10459), 1988
7. G.R.Odette y G.E.Lucas, EPRI NP-6114, Palo Alto, California, 1989

# ESTUDIO DE TENSIONES Y DEFORMACIONES RESIDUALES EN COMPUESTOS AL-MG DEFORMADOS POR EXTRUSIÓN MEDIANTE LA TÉCNICA DE TIEMPO DE VUELO DE DIFRACCIÓN DE NEUTRONES

R.E. Bolmaro\*, A. Fourty\*, Chr. Bittorf\*\*, H.-G. Priesmeyer\*\* y H.-G. Brokmeier\*\*

\* Instituto de Física Rosario-Fac. Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET-UNR. Bv. 27 de febrero 210 bis. 2000. Rosario. Argentina.

\*\* Institut für Metallkunde und Metallphysik der Technische Universität Clausthal. GKSS Forschungszentrum Geesthacht, Max-Planck-Str. 03, D-21502 Geesthacht, Germany  
e-mail: bolmaro@ifir.ifir.edu.ar

En el presente trabajo se informa un estudio experimental de las deformaciones residuales de 1ro y 2do orden desarrolladas en compuestos Al-Mg deformados por extrusión. El proceso de medición se llevó a cabo mediante la técnica de tiempo de vuelo de difracción de neutrones (1). Las deformaciones residuales de 1er. orden son calculadas para diferentes planos cristalinos de ambas fases en diferentes direcciones de probetas cilíndricas. El ajuste de la posición y ancho de picos fue efectuado mediante desarrollos de Fourier locales hasta un orden en que los errores admitidos se encontraban en el 0.01 %. La dependencia con la dirección respecto del eje central de las probetas fue estudiada para una fracción de volumen 50%Al-50%Mg. Cinco fracciones de volumen diferentes de ambas fases (100% Al, 75%Al25%Mg, 50%Al50%Mg, 25%Al-75%Mg y 100%Mg) fueron medidas a deformaciones equivalentes de 2.6 y 2.8. Se describen los resultados y se estudia la correlación entre fracción de volumen de ambas fases y las deformaciones medidas.

In the current paper we show experimental residual strains of the 1st and 2nd kind in Al-Mg composites deformed by extrusion. The measurements were taken by the Time of Flight (TOF) neutron diffraction technique (1). The position and width of diffraction peaks were fitted by local Fourier expansions until the relative errors were less than 0.01 %. The dependence with respect to the axis transversal to the longitudinal direction was measured for a volume fraction of 50%Al-50%Mg. Five different volume fractions of both phases (100% Al, 75%Al25%Mg, 50%Al50%Mg, 25%Al-75%Mg and 100%Mg) were measured at Von Mises equivalent strains of 2.6 and 2.8. The results are described and the correlation between volume fraction of both phases and measured deformations are studied.

**Keywords:** Deformaciones residuales, texturas, materiales bifásicos, co-deformación

## I.- Introducción

Las deformaciones residuales en materiales multifásicos se dan como consecuencia de varios factores. Las diferencias entre coeficientes de dilatación térmica pueden ocasionar deformaciones residuales durante el proceso de enfriamiento como consecuencia de los distintos cambios dimensionales de las fases. Las deformaciones producidas por acción de cargas mecánicas se reparten entre las fases en función de las propiedades elásticas de cada fase. Por último, cuando un material es sometido a deformaciones elastoplásticas y se descarga, subsisten deformaciones residuales que dependen en una forma bastante compleja de las interacciones y deformaciones de las distintas fases.

## II.- Resultados experimentales

En el presente trabajo se midieron las deformaciones residuales resultantes de un proceso de grandes deformaciones por extrusión en materiales compuestos de fases codeformantes. Los contenidos de ambas fases se variaron a pasos del 25% incluyendo los materiales puros en ambos extremos. El objetivo es el estudio de la influencia sobre las deformaciones residuales de las codeformaciones elasto-plásticas. Las Figs. 1 y 2

muestran las deformaciones residuales obtenidas para planos de Mg y Al, respectivamente, en función de la fracción de volumen de Al.

Las deformaciones residuales medidas por corrimiento de pico son las comúnmente llamadas de 1er. tipo u orden. En nuestro caso se trata de deformaciones residuales autobalanceadas, en la pieza como un todo, tanto entre diferentes planos de una misma fase como entre diferentes fases.

Se efectuó un estudio del ensanchamiento de picos de difracción por la misma técnica de ajuste y comparación con referencias de polvos metálicos libres de tensiones. Las deformaciones y tensiones de 2do orden se interpretan en términos de la interacción entre granos y desajustes elásticos y plásticos desarrollados en el proceso de deformación (2-3). El ancho de pico es representativo de inhomogeneidades en la deformación que se compensan usualmente en distancias del orden del tamaño de grano. En nuestro caso la compensación se efectúa tanto entre primeros vecinos de la misma fase como de fases diferentes.

Las Figs. 3 y 4 muestran los anchos de pico a mitad de altura de pico ( $\frac{1}{2}$ FWP) comparados con los obtenidos para el polvo original libre de tensiones residuales.