

PMT3540 - Aula 8 - Endurecimento por irradiação

Cláudio Geraldo Schön

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

15 de agosto de 2020

Mecanismos

- Clusters de defeitos
- Complexos defeito-impurezas
- Anéis de discordâncias (com ou sem defeito de empilhamento)
- Discordâncias (anéis decompostos que se juntam à rede)
- Cavidades e bolhas
- Precipitados

Irradiação e resistência mecânica

Dois possíveis efeitos:

- Efeitos sobre a tensão de bloqueio – tensão necessária para que a discordância inicie o escorregamento
- Efeitos sobre a tensão de fricção – tensão necessária para que a discordância mantenha seu movimento, anteriormente iniciado

Olander argumenta que em algumas situações a distinção pode não ser muito nítida.

Tensão de bloqueio

Tensão de bloqueio ocorre em metais CFC irradiados e em metais CCC irradiados e não irradiados → limite de escoamento superior e inferior na curva $\sigma \times \epsilon$.

Tensão de bloqueio

Tensão de bloqueio ocorre em metais CFC irradiados e em metais CCC irradiados e não irradiados → limite de escoamento superior e inferior na curva $\sigma \times \epsilon$.

Tensão necessária para ativar as fontes de discordância que se encontram bloqueadas pela interação com defeitos e impurezas.

Tensão de bloqueio

Tensão de bloqueio ocorre em metais CFC irradiados e em metais CCC irradiados e não irradiados → limite de escoamento superior e inferior na curva $\sigma \times \epsilon$.

Tensão necessária para ativar as fontes de discordância que se encontram bloqueadas pela interação com defeitos e impurezas. Olander se limita ao caso de fontes de Frank - Read, mas é importante lembrar que fontes associadas ao contorno de grão frequentemente são mais importantes.

Bandas de Lüdders

Em metais irradiados, a presença de clusters de defeitos, que interagem com as discordâncias, aumenta a tensão necessária para ativas as fontes, mas ao iniciar o escorregamento as discordâncias dissolvem os clusters e a tensão necessária para continuar o movimento decresce → instabilidade plástica (banda de Lüdders).



Modelo de Seeger

Disperse Barrier Hardening, DBH

Singh et al. revisam um modelo proposto originalmente por Seeger, que é denominado “Endurecimento por barreiras dispersas” (*Disperse barrier hardening, DBH*), que, conforme os autores afirmam, nada mais é que a aplicação do mecanismo de Orowan assumindo que os clusters formados nas cascatas atuam como barreiras para a movimentação de discordâncias.

Baseado em: B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus “Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering” *J.*

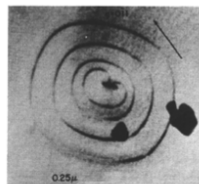
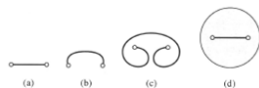
Nucl. Mater. **249** (1997) 103 – 115.

Operação de fontes de Frank-Read

A tensão de operação de uma fonte de Frank-Read é:

$$\tau_{FR} = \alpha \frac{Gb}{l}$$

onde l é a distância entre pontos de travamento da discordância e α é um termo constante que representa a “força” dos obstáculos. A transição suave do escoamento em metais CFC (e alguns CCC) é explicada por uma distribuição ampla de valores para l .



(e)

Aplicação ao dano por irradiação

Assumindo-se que as regiões das cascatas atuam como bloqueios, a distância l é:

$$l = \frac{1}{(Nd)^{\frac{1}{2}}}$$

onde N é o número de cascatas e d é o diâmetro da região danificada, assim:

$$\tau_{FR} = \alpha Gb (Nd)^{\frac{1}{2}}$$

Assumindo que os nêutrons incidentes formam cascatas isoladas:

$$N \approx \phi t \Rightarrow \tau_{FR} \approx (\phi t)^{\frac{1}{2}}$$

Baseado em: B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus "Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering" *J.*

Nucl. Mater. **249** (1997) 103 – 115.

Críticas ao modelo DBH

Singh *et al.* listam diversas críticas ao modelo DBH, incluindo o fato de que os clusters não são esperados como barreiras muito eficientes ao escorregamento das discordâncias e a dependência do modelo a uma floresta de discordâncias preexistente, que nem sempre é justificável.

Endurecimento de fontes induzido por cascata

Cascade-induced source hardening, CISH

Singh *et al.* propõem um modelo alternativo, denominado “Endurecimento de fontes induzido por cascata” (*Cascade-induced source hardening, CISH*). Na estrutura desse modelo os autores assumem que as fontes de Frank - Read ficam “decoradas” por anéis e clusters de autointersticiais por conta da irradiação, que bloqueiam as fontes até que uma sobretensão seja aplicada. Nesse modelo as fontes atuam como atratores de anéis glísseis produzidos pelas cascatas, segundo os autores em baixas densidades de discorâncias a zona de atração pode atingir distância de até 100 nm. No equilíbrio as forças se compensam, formando uma “atmosfera” de anéis em torno das fontes.

B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus “Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering” *J. Nucl. Mater.* **249** (1997) 103 – 115.

Distância de repouso de anéis

Anéis que se aproximem demais de discordâncias podem interagir com a linha mudando seu vetor de Burgers → absorção. A tensão necessária para alterar o vetor de Burgers do anel é de raio r_1 :

$$\tau_{bv} = \frac{Gb}{\beta r_1}$$

onde $\beta \approx 3$ é um fator de correção para o tamanho reduzido do anel.

B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus "Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering" *J. Nucl. Mater.* **249** (1997) 103 – 115.

Distância de repouso de anéis

Outro mecanismo possível seria a evaporação do anel intersticial pela ação da discordância:

$$t_{es} = \left\{ \omega_i \exp \left[- \frac{(E_b^i + E_m^i - p\Delta V)}{k_B T} \right] \right\}^{-1}$$

onde t_{es} é o tempo de escape do intersticial, ω_i é a frequência de vibração do intersticial, $E_{b,m}^i$ são as energias de ligação e de migração de intersticiais e p é a estimativa da tensão hidrostática que a discordância impõe ao anel:

$$p \approx \frac{Gb}{2\pi y}$$

onde y é a distância entre o anel e a discordância. A variação de volume é estimada em $0,3\Omega_a$.

B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus "Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering" *J. Nucl. Mater.* **249** (1997) 103 – 115.

Interação de anéis e discordâncias

A força que um anel intersticial de diâmetro d , situado a uma distância y é máxima a 40° da normal do plano de escorregamento e vale:

$$F_{dl} = 0,069 \frac{G}{(1 - \nu)} \left(\frac{bd}{y} \right)^2$$

Já a força que uma tensão remota τ exerce sobre a discordância é:

$$F_{\tau d} = \tau b l$$

assumindo $\nu = 0,333$ a tensão de desbloqueio é:

$$F_{dl} = F_{\tau d} \Rightarrow \tau \approx 0,1 G \frac{b}{l} \left(\frac{d}{y} \right)^2$$

Segundo os autores o modelo justifica um aumento de até 300 MPa no limite de escoamento do cobre irradiado com nêutrons a 325 K com valores razoáveis para as variáveis microestruturais.

B. N. Singh, A. J. E. Foreman, H. Trinkaus "Radiation hardening revisited: the role of intercascade clustering" *J. Nucl. Mater.* **249** (1997) 103 – 115.

Efeitos dissipativos

Olander divide os efeitos dissipativos sobre o movimento das discordâncias em duas categorias:

- Forças de longo alcance, τ_L
- Forças de curso alcance, τ_C

As forças de longo alcance surgem da interação da discordância em escorregamento com as demais discordâncias presentes na microestrutura, já as forças de curto alcance surgem da interação da discordância com defeitos mais localizados, como clusters, precipitados, cavidades e anéis.

Forças de longo alcance

Modelo de Taylor

A força que uma discordância exerce sobre outra é máxima quando as duas se situam no mesmo plano de escorregamento e vale:

$$F^{max} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)d}$$

onde d é a distância de separação que pode ser estimada em função da densidade de discordâncias, ρ_d :

$$d = (\pi\rho_d)^{-1}$$

Assim (assumindo-se $\nu = 0,3$):

$$F^{max} \approx \alpha Gb^2 \sqrt{\rho_d} \Rightarrow \tau_L = \frac{F^{max}}{bl} = \alpha Gb \sqrt{\rho_d} l$$

com $\alpha = 0,44$, sendo l o comprimento da linha.

Forças de curto alcance

Precipitados incoerentes (mecanismo de Orowan)

A tensão de linha de uma discordância em cunha é dada por:

$$\Gamma = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \left(\frac{R}{r_c} \right)$$

onde r_c é o raio do núcleo e R é alguma distância característica da microestrutura, no presente caso, a distância entre partículas, ℓ_p :

$$R = \frac{\ell_p}{2}$$

A tensão de linha está associada à tensão de fricção por:

$$\tau_C^p = \frac{\Gamma}{bR} = \frac{2\Gamma}{b\ell_p} \approx \frac{Gb}{2\pi\ell_p} \ln \left(\frac{\ell_p}{2r_c} \right)$$

Forças de curto alcance

Precipitados incoerentes (mecanismo de Orowan)

Considerando a densidade de partículas (número de partículas por unidade de volume), N_p :

$$\ell_p = (N_p)^{-1}$$

Assim

$$\tau_C^p = \alpha_p Gb \sqrt{N_p}$$

com

$$\alpha_p = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{\ell_p}{2r_c} \right)$$

Precipitados coerentes

Precipitados coerentes afetam o limite de escoamento quando os precipitados são cortados por uma discordância → diversos fatores:

- aumento da área de interface (interfaces possuem tensão superficial, portanto aumentar a área dissipa energia)
- criação de contornos de anti-fase (os precipitados frequentemente são ordenados, portanto a discordância cria um contorno de anti-fase → aumento de energia do cristal)
- diferenças de módulo e de tensão de Peierls (podem afetar a tensão de linha)

Precipitados coerentes

Modelo de Russel e Brown (1972)

Russel e Brown procuravam descrever o endurecimento observado em ligas Fe – 2% Cu, que apresentam precipitados coerentes, mas que possuem a mesma estrutura CFC → diferenças de módulo.

K. C. Russel, L. M. Brown "A dispersion strengthening model based on differing elastic moduli applied to iron – copper system"

Acta Metall. **20** (1970) 969 – 974.

Modelo de Russel e Brown

Sejam E_1 e E_2 as energias específicas dos trechos de discordância no interior do precipitado e no interior da matriz, define-se:

$$\phi_{min} = 2 \sin^{-1} \left(\frac{E_1}{E_2} \right)$$

Para a resistência:

$$\sigma_e = \begin{cases} \frac{0,8Gb}{l_p} \left[1 - \frac{(E_1)^2}{(E_2)^2} \right]^{\frac{1}{2}} & \phi_{min} \geq 50^\circ \\ \frac{0,8Gb}{l_p} \left[1 - \frac{(E_1)^2}{(E_2)^2} \right]^{\frac{3}{4}} & \phi_{min} \leq 50^\circ \end{cases}$$

onde

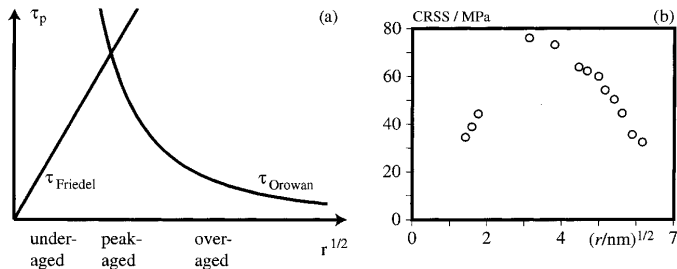
$$\frac{E_1}{E_2} = \frac{E_1^\infty \ln \left(\frac{r_p}{r_c} \right)}{E_2^\infty \ln \left(\frac{R}{r_c} \right)} + \frac{\ln \left(\frac{R}{r_p} \right)}{\ln \left(\frac{R}{r_c} \right)}$$

K. C. Russel, L. M. Brown "A dispersion strengthening model based on differing elastic moduli applied to iron – copper system"

Acta Metall. **20** (1970) 969 – 974.

Resultados de Mohles, Rönnpagel e Nembach

Mohles, Rönnpagel e Nembach publicaram resultados de simulação que procurava tratar o problema do endurecimento por precipitação de uma forma unificada, sem a necessidade de considerar o estado da interface.



V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach "Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials" *Comp. Mater. Sci.* **16** (1999) 144 – 150.

Casos limite

- Partículas pequenas → precipitados são cortados (Friedel)
- Partículas grosseiras → precipitados são contornados (Orowan)

$$\tau_{\text{Friedel}} = \frac{Gb}{r\sqrt{\pi\omega_q}} \sqrt{f} \left(\frac{2\gamma\omega_r r}{Gb^2} \right)^{\frac{3}{2}} \approx \frac{1}{\sqrt{r}}$$

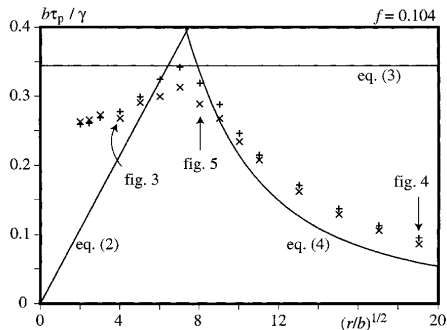
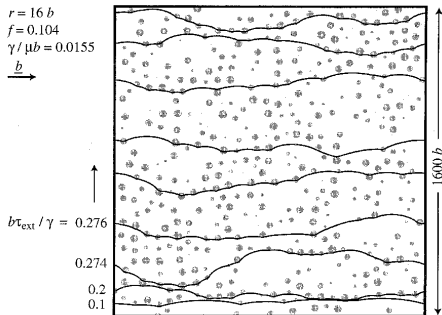
$$\tau_{\text{Orowan}} = \frac{Gb}{\left(\sqrt{\frac{\pi\omega_q}{r}} - 2\omega_r \right) r} \approx \frac{1}{r}$$

onde $\omega_r = 0,82$ e $\omega_q = 0,75$ são variáveis geométricas associadas à distribuição respectivamente de raio e de área de precipitados na intersecção com o plano de deslizamento.

V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach "Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials" *Comp. Mater. Sci.* **16** (1999) 144 – 150.

Resultados

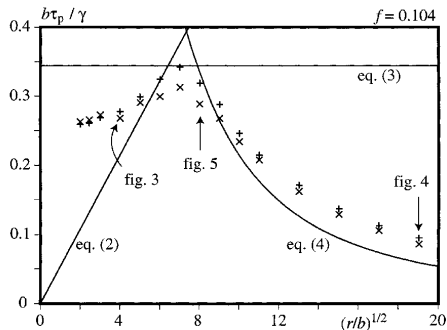
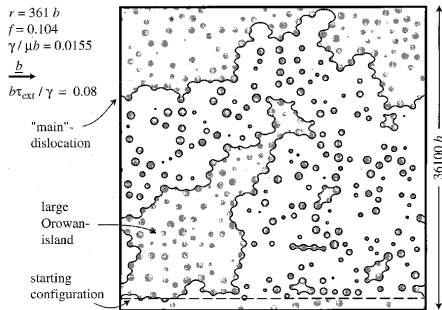
Figure 3



V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach "Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials" *Comp. Mater. Sci.* **16** (1999) 144 – 150.

Resultados

Figure 4



V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach "Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials" *Comp. Mater. Sci.* **16** (1999) 144 – 150.

Resultados

Figure 5

$$r = 64 b$$

$$f = 0.104$$

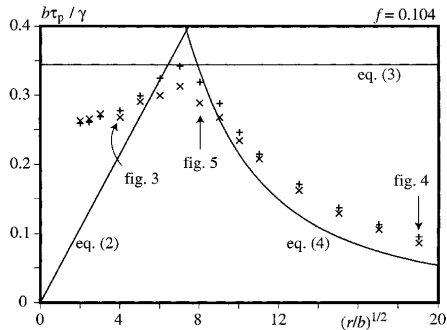
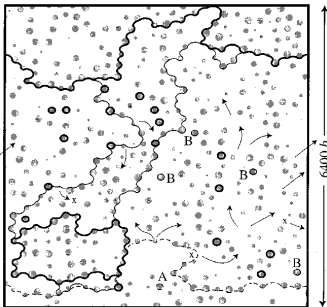
$$\gamma / \mu b = 0.0155$$

$$\frac{b}{b} \rightarrow$$

from the right side

$$b\tau_{\text{ext}} / \gamma =$$

- 0.242
- 0.268
- 0.302



V. Mohles, D. Rönnpagel, E. Nembach "Simulation of dislocation glide in precipitation hardened materials" *Comp. Mater. Sci.* **16** (1999) 144 – 150.

Cavidades (e bolhas)

Para fins de endurecimento, cavidades (e bolhas) atuam como precipitados coerentes. A força necessária para cortar uma cavidade (*void*) é:

$$F_v = \frac{U_v}{r_v} = \tau_{CRSS} b l_v$$

onde U_v é a energia elástica do sólido contendo a cavidade, r_v é o raio da cavidade e l_v é a distância média entre cavidades no plano de escorregamento.

Considerando a energia elástica da discordância:

$$U_d = \frac{Gb^2}{8\pi^2 (r_v)^2}$$

A energia elástica do sólido pode ser aproximada por:

$$U_v = \int_{r_c}^R 4\pi r^2 U_d dr = \frac{Gb^2}{2\pi} (R - r_c) \approx \frac{Gb^2}{2\pi} R$$

Cavidades (e bolhas)

Para fins de endurecimento, cavidades (e bolhas) atuam como precipitados coerentes. A força necessária para cortar uma cavidade (*void*) é:

$$F_v = \frac{U_v}{r_v} = \tau_{CRSS} b l_v$$

onde U_v é a energia elástica do sólido contendo a cavidade, r_v é o raio da cavidade e l_v é a distância média entre cavidades no plano de escorregamento.

A energia elástica do sólido pode ser aproximada por:

$$U_v = \int_{r_c}^R 4\pi r^2 U_d dr = \frac{Gb^2}{2\pi} (R - r_c) \approx \frac{Gb^2}{2\pi} R$$

Resolvendo para a tensão:

$$\tau_{CRSS} = \frac{1}{2\pi} \frac{Gb}{l_v} \Rightarrow \tau_{CRSS} = \alpha_v Gb \sqrt{N_v}$$

Superposição dos diferentes mecanismos

Os diversos mecanismos podem ser expressos como:

$$\tau_{CRSS} = \alpha' Gb\sqrt{\rho'}$$

qua são aproximadamente aditivos e no final o limite de escoamento pode ser obtido usando o fator de Taylor (para policristais):

$$\sigma_e = M\tau_{CRSS}$$

Velocidade média de discordâncias

A velocidade média é dada por:

$$\bar{v} = \beta b \nu_d \exp \left[-\frac{\Delta G(\tau)}{k_B T} \right]$$

onde

$$\Delta G(\tau) = \Delta F \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^p \right]^q$$

Sendo ΔF uma energia de ativação, τ_0 é a tensão de superação dos obstáculos a 0 K, $0 \leq p \leq 1$ e $1 \leq q \leq 2$ são expoentes fenomenológicos com valores ótimos próximos a $p = \frac{2}{3}$ e $q = \frac{3}{2}$.

Dependência da taxa de deformação

Como a taxa de deformação está relacionada à velocidade média das discordâncias:

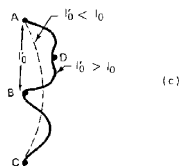
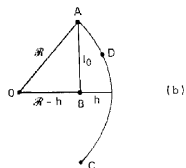
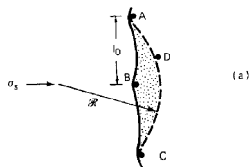
$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ - \frac{\Delta F \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^p \right]^q}{k_B T} \right\}$$

Zonas de exclusão

Olander relata que em componentes como o vaso de pressão que contém o reator (baixa incidência de nêutrons rápidos, baixas temperaturas) o dano é basicamente devido à formação de **zonas de exclusão** (cascatas de dano) → modelo de Seeger.

Modelo de Seeger

Construção



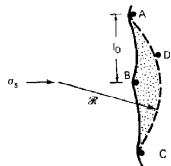
- a. Discordância no plano de escorregamento, sujeita a uma tensão aplicada σ_i , restrita obstáculos A, B, C (contratensão σ_{LR}),

$$\sigma_s = \sigma_i - \sigma_{LR}$$

- b. Construção gráfica simplificada para determinação de l_0
- c. Demonstração de que a construção simplificada não corresponde ao comprimento real

Modelo de Seeger

Construção

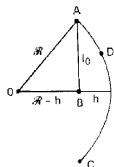


(a)

Raio de curvatura (\mathcal{R}):

$$l^2 = hl_0$$

$$\mathcal{R} = \frac{Gb}{\sigma_s}$$



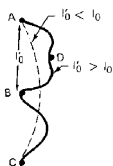
(b)

mas

$$\mathcal{R}^2 = l_0^2 + (\mathcal{R} - h)^2$$

combinando (e assumindo $h(2\mathcal{R})^{-1} \ll 1$)

$$l_0 = \left(\frac{2Gb l^2}{\sigma_s} \right)^{\frac{1}{3}}$$

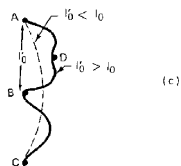
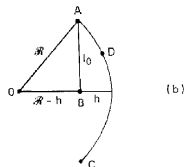
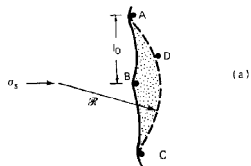


(c)

Em (c) observa-se que a configuração de equilíbrio real da discordância implica que $l'_0 > l_0$.

Modelo de Seeger

Construção



Calculando a taxa de deformação:

$$\dot{\epsilon} = \rho b v_d$$

a velocidade

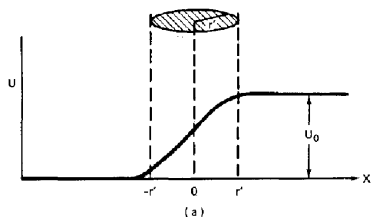
$$v_d = h \Gamma \simeq l \Gamma$$

onde Γ é a probabilidade de que a discordância supere o obstáculo.

$$\Gamma = \nu \exp\left(-\frac{U^*}{k_B T}\right)$$

Modelo de Seeger

Resultado

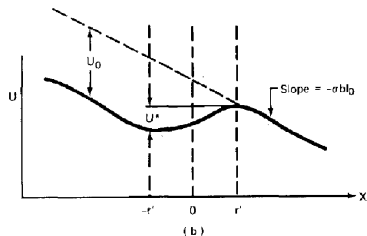


$$\dot{\epsilon} = \rho l b v \exp\left(-\frac{U^*}{k_B T}\right)$$

com

$$r' = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{2}} r$$

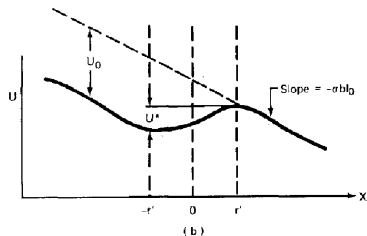
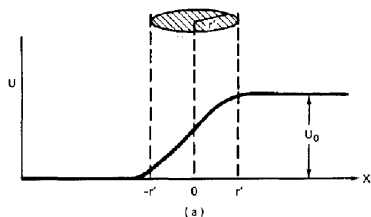
a força de resistência em $-r < x < r$ é $\frac{dU}{dx}$, com tensão (figura b):



$$-\frac{dU(x, \sigma_s)}{dx} = -\frac{dU(x, 0)}{dx} + \sigma_s b l_0$$

Modelo de Seeger

Resultado



$$\dot{\epsilon} = \rho l b v \exp\left(-\frac{U^*}{k_B T}\right)$$

com

$$r' = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{2}} r$$

Integrando:

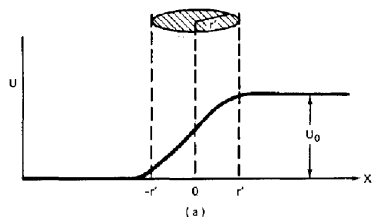
$$U(x, \sigma_s) = U(x, 0) - \sigma_s b l_0 x + \text{const.}$$

A discordância supera o obstáculo quando

$$U^* = U(-r', \sigma_s) - U(+r', \sigma_s)$$

Modelo de Seeger

Resultado



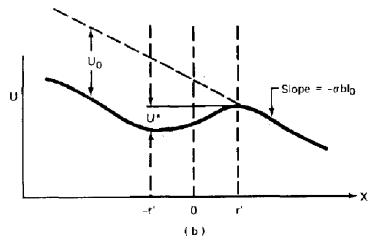
$$\dot{\epsilon} = \rho l b \nu \exp\left(-\frac{U^*}{k_B T}\right)$$

com

$$r' = \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{2}} r$$

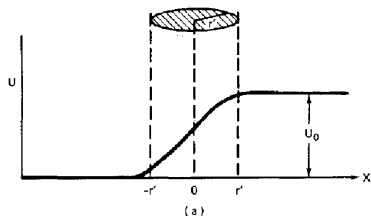
Seeger assume:

$$U(x, 0) = U_0 \left[1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{x}{r'}\right)} \right]$$



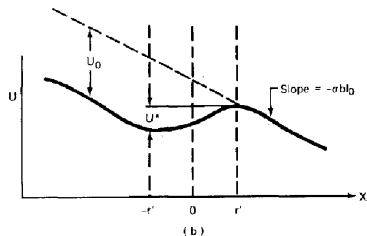
Modelo de Seeger

Resultado



$$U^* = U_0 \left(1 - \frac{4\sigma_s b l_0 r'}{U_0} \right)^{\frac{3}{2}}$$

a discordância supera o obstáculo quando o termo entre parênteses muda de sinal (para $T = 0$ K):



$$\sigma_s^0 = \left[\frac{U_0}{4 \left(\frac{2}{3} \right)^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{3}{2}} \frac{N^{\frac{1}{2}}}{b^2 G^{\frac{1}{2}} r}$$

Modelo de Seeger

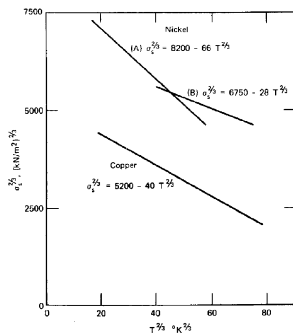
Resultados (efeito de T)

$$\sigma_s = \sigma_s^0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^{\frac{3}{2}}$$

com

$$T_C = \frac{U_0}{k_B \ln \left[\frac{\rho b \nu}{\dot{\epsilon} \sqrt{(2rN)}} \right]}$$

Cobre e Níquel irradiados com nêutrons rápidos (fluência de $7 \times 10^{19} \text{ n}^0 \text{ cm}^{-2}$) a $100 \text{ }^\circ\text{C}$, testados em $-200 \leq T \leq +200 \text{ }^\circ\text{C}$.



Saturação do endurecimento

Justificativa e resultados empíricos

Segundo o discutido até agora:

$$\sigma_e \propto (N)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \sigma_e \propto (\phi t)^{\frac{1}{2}}$$

entretanto isso conflita com observações experimentais de que o limite de escoamento satura a partir de uma dada dose de dano.

O modelo de Makin e Minter

Olander → cascatas em uma região produzem dano, mas cascatas posteriores na mesma região não produzem com a mesma eficiência → zonas de exclusão.

$$\frac{dN}{dt} = \zeta \Sigma_s \phi (1 - VN) \Rightarrow N = \frac{1}{V} [1 - \exp(-\zeta \Sigma_s V \phi t)]$$

onde ζ é o número de zonas produzidas no impacto (para nêutrons, $\zeta = 1$), Σ_s é a seção de choque e V é o volume irradiado.

O modelo de Makin e Minter

Olander → cascatas em uma região produzem dano, mas cascatas posteriores na mesma região não produzem com a mesma eficiência → zonas de exclusão.

$$\frac{dN}{dt} = \zeta \Sigma_s \phi (1 - VN) \Rightarrow N = \frac{1}{V} [1 - \exp(-\zeta \Sigma_s V \phi t)]$$

onde ζ é o número de zonas produzidas no impacto (para nêutrons, $\zeta = 1$), Σ_s é a seção de choque e V é o volume irradiado.
ou seja

$$\sigma_e \propto [1 - \exp(-\zeta \Sigma_s V \phi t)]^{\frac{1}{2}}$$

Recozimento de zonas de exclusão

Olander, adaptando um modelo original de Dollins.

Zonas de exclusão, inicialmente com tamanho R_0 , agem como sorvedouros de lacunas e intersticiais \rightarrow distribuição $N(R, t)$ de tamanhos de zonas de exclusão.

Dollins adapta o modelo para crescimento de bolhas em combustíveis (Aula 7) ao problema da determinação de $N(R, t)$:

$$\dot{R} = \frac{dR}{dt} = -\frac{\Omega}{R} \left\{ D_i c_i - D_l \left[c_l - c_l^{eq} \exp \left(\frac{2\gamma\Omega}{Rk_B T} \right) \right] \right\} \quad (1)$$

c_i e c_l são as concentrações de defeitos em estado estacionário, o número de defeitos criados por zona, ν_i, ν_l , é associado como:

$$\nu_i = \nu_l + \frac{4\pi R_0^3}{3\Omega}$$

onde ν_i é estimado a partir de algum modelo de dano (por exemplo Kinchin-Pease), reduzido por um fator para acomodar aniquilação de pares intersticial - lacuna.

Modelo de Dollins - Olander

Simplificações

- A taxa de dano é aproximada por $\Sigma_s \phi$,
- os termos de eficiência de sorvedouros, Z_i e Z_l são adaptados do caso das bolhas, assumindo-se controle difusional puro, assume-se ainda que $Z_i = Z_l = Z$,
- supersaturações elevadas justificam ignorar c_i^{eq} e
- o tratamento original de bolhas é complementado com termos representando a absorção dos defeitos puntiformes pelas zonas de exclusão.

Modelo de Dollins - Olander

Balanco de produção/aniquiação de defeitos

$$\nu_i \Sigma_s \phi = Z \rho_d D_i c_i + k_{ij} c_i c_j + \int_0^{R_0} 4\pi R D_i c_i N(R, t) dR$$

$$\begin{aligned} \nu_i \Sigma_s \phi = & Z \rho_d D_i (c_i - c_i^{eq}) + k_{ij} c_i c_j + \\ & + \int_0^{R_0} 4\pi R D_i \left[c_i - c_i^{eq} \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{Rk_B T}\right) \right] N(R, t) dR \end{aligned}$$

A integração termine em R_0 por que as zonas encolhem por ação do recozimento.

Modelo de Dollins - Olander

Cálculo da taxa de encolhimento

As zonas com tamanhos situados entre R e $R + dR$ num certo tempo t são as que foram formadas (com tamanho R_0) no intervalo $d\tau$, tal que

$$N(R, t) dR = \sum_s \phi d\tau$$

Modelo de Dollins - Olander

Cálculo da taxa de encolhimento

As zonas com tamanhos situados entre R e $R + dR$ num certo tempo t são as que foram formadas (com tamanho R_0) no intervalo $d\tau$, tal que

$$N(R, t) = \Sigma_s \phi \left| \frac{\partial \tau}{\partial R} \right|_t$$

Modelo de Dollins - Olander

Cálculo da taxa de encolhimento

As zonas com tamanhos situados entre R e $R + dR$ num certo tempo t são as que foram formadas (com tamanho R_0) no intervalo $d\tau$, tal que Considerando o estado estacionário (c_i e c_j constantes) pode-se integrar a Equação 1 entre R_0 e R para determinar o valor de τ :

$$\int_{R_0}^R \frac{dR'}{\dot{R}'} = \int_{\tau}^t dt' = t - \tau$$

Modelo de Dollins - Olander

Cálculo da taxa de encolhimento

As zonas com tamanhos situados entre R e $R + dR$ num certo tempo t são as que foram formadas (com tamanho R_0) no intervalo $d\tau$, tal que Considerando o estado estacionário (c_i e c_j constantes) pode-se integrar a Equação 1 entre R_0 e R para determinar o valor de τ :

$$\int_{R_0}^R \frac{dR'}{\dot{R}'} = \int_{\tau}^t dt' = t - \tau$$

Diferenciando com respeito a R :

$$\left| \frac{\partial \tau}{\partial R} \right|_t = -\frac{1}{\dot{R}} \Rightarrow N(R, t) = -\frac{\Sigma_s \phi}{\dot{R}}$$

Modelo de Dollins - Olander

Solução

Usando a Equação 1:

$$N(R, t) = \frac{\sum_s \phi}{\Omega} \frac{R}{D_i c_i - D_l \left[c_l - c_l^{eq} \exp\left(\frac{2\gamma\omega}{Rk_B T}\right) \right]}$$

Usando as equações de balanço e após algumas simplificações:

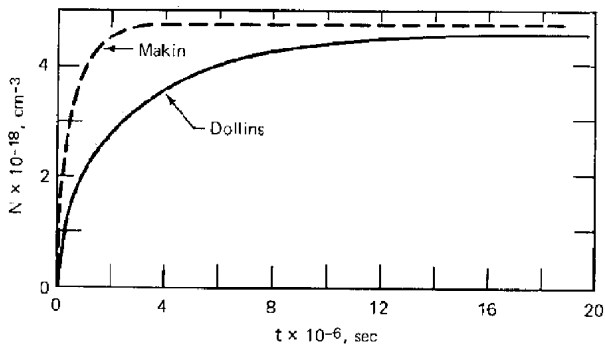
$$N(R) = \frac{\sum_s \phi R^2}{D_l c_l^{eq} \Omega^2 \left(\frac{2\gamma}{k_B T}\right)}$$

Integrando:

$$N = \frac{\sum_s \phi R_0^3}{3D_l c_l^{eq} \Omega^2 \left(\frac{2\gamma}{k_B T}\right)}$$

Modelo de Dollins - Olander

Solução



Simulação comparando o Modelo de Makin (volume esférico de 75\AA de diâmetro) e do Modelo de Dollins com valores fisicamente razoáveis dos parâmetros (veja Olander).

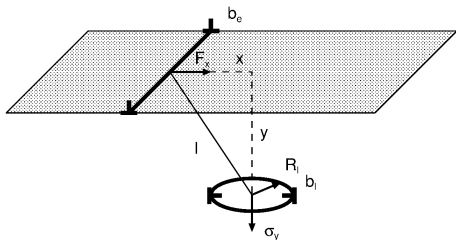
Fim da primeira parte

Endurecimento por anéis

Anéis de condensação de intersticiais:

- com defeito de empilhamento → cunha
- sem defeito de empilhamento → misto cunha - hélice

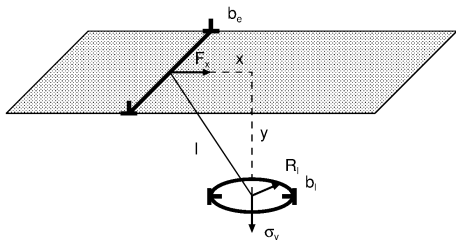
Geometria do problema:



$$\sigma_s = \frac{F_{max}}{b_e l}$$

Cálculo do trabalho de expansão do anel

Geometria do problema:



Do estado de tensão da discordância em cunha \rightarrow a componente σ_y exerce uma força radial sobre o anel. O trabalho para expandir o anel de R para $R + dR$ é:

$$dW = (2\pi R_l) \sigma_y b_l dR$$

Integrando:

$$W = \pi R_l^2 \sigma_y b_l$$

Força máxima

Do trabalho:

$$W = \pi R_l^2 \sigma_y b_l$$

mas

$$\sigma_y = \frac{Gb_e}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

então

$$F_x = -\frac{dW}{dx} = -\frac{Gb_e b_l R_l^2}{(1-\nu)} \frac{xy(3y^2 - x^2)}{(x^2 + y^2)^3}$$

Na derivação assumiu-se que σ_y varia pouco no plano do anel. A Força máxima:

$$F_{max} = \frac{\alpha Gb_e b_l}{2(1-\nu)} \left(\frac{R_l}{y}\right)^2$$

Força máxima

$$F_{max} = \frac{\alpha G b_e b_l}{2(1 - \nu)} \left(\frac{R_l}{y} \right)^2$$

O coeficiente α depende da orientação relativa dos vetores de Burgers, média sobre todas as orientações e para uma distribuição homogênea de anéis em uma camada de espessura $2R_l$ em torno do plano de escorregamento (Kroupa e Hirsch):

$$F_{max} \simeq \frac{1}{8} G b_e b_l$$

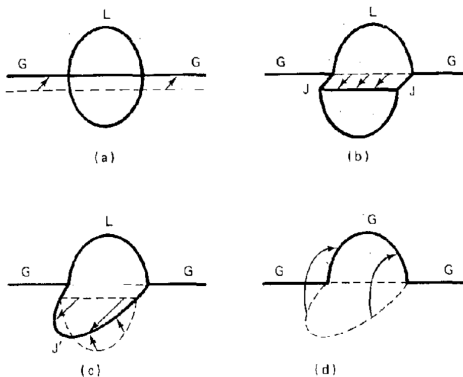
O efeito médio de endurecimento será:

$$\sigma_s = \frac{1}{8} \frac{G b_l}{l}$$

Efeito sobre o limite de resistência

- O efeito da irradiação sobre o limite de escoamento é muito maior que sobre o limite de resistência → redução do coeficiente de encruamento e da razão elástica → surgimento precoce da estrição.
- Efeito dos obstáculos produzidos pela deformação plástica (encruamento) é obscurecido pelos inúmeros obstáculos já produzidos pela irradiação.
- Em alguns casos estrição surge logo no limite de escoamento → amolecimento por deformação (*dislocation channelling*) → destruição de obstáculos (principalmente anéis intersticiais) pela passagem da discordância glíssil.

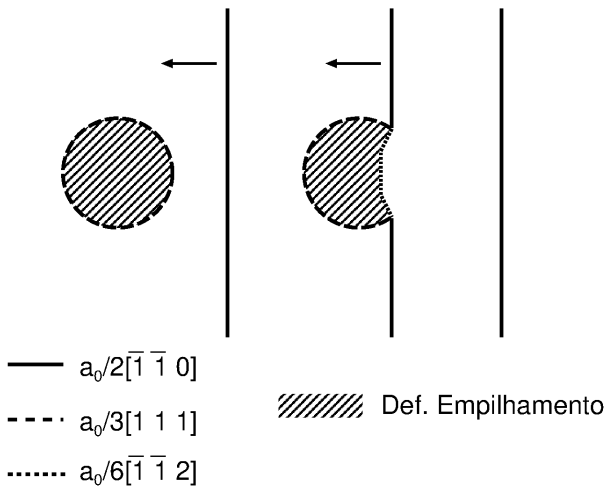
Mecanismo de Foremen e Sharp



A. J. E. Foreman, J. V. Sharp "A mechanism for the sweeping-up of loops by glide dislocations during deformation" *Phil. Mag.* (S.

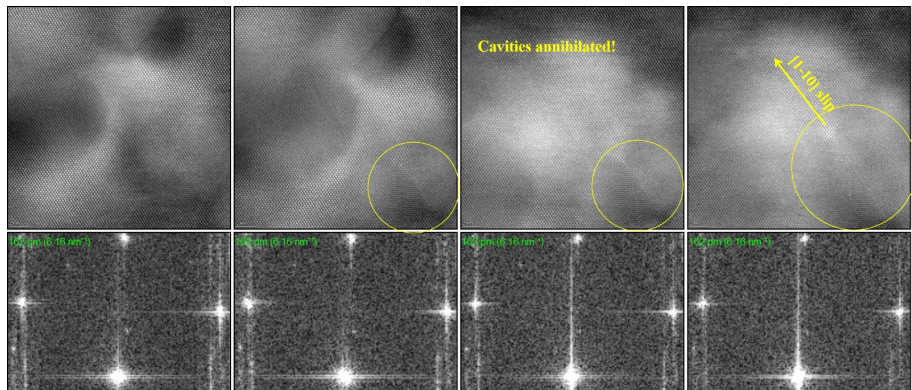
8) **19** (1969) 931 – 937.

Mecanismo de *unfaulting*



Observação *in situ* de um evento de aniquilação

Alumínio, irradiado com elétrons (100 keV)



M. A. Tunes, comunicação privada, *Montanuniversität Leoben*, Áustria, 2020.

A revisão de Byun, Farrell e Li

Em 2008 Byun, Farrell e Li (*Acta Mater.* **56**, 2008, 1044 –1055 e 1056 – 1064) publicaram dois artigos em que reportam resultados de ensaios mecânicos em 13 materiais com estrutura CCC, 11 com a estrutura CFC e 2 com estrutura HCP em função do dano produzido por nêutrons e feixes de prótons de alta energia, representando os resultados de ensaios mecânicos em planos tensão real versus dose (entre outros), os resultados serão usados aqui para ilustrar o efeito geral da irradiação sobre o comportamento mecânico dos materiais.

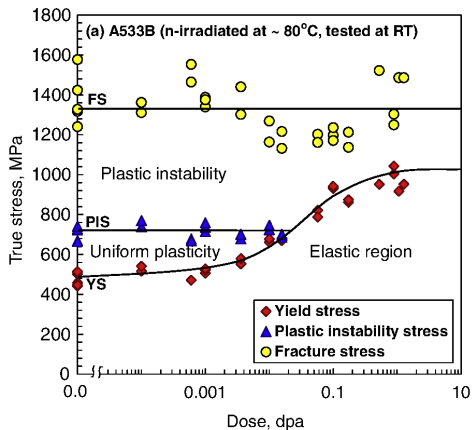
Definições:

YS Tensão(real) de escoamento

PIS Tensão (real) de desenvolvimento de instabilidade plástica

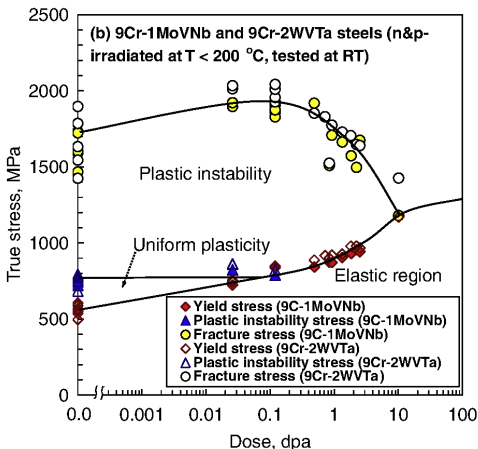
FS Tensão (real *) de fratura.

Aços ferríticos



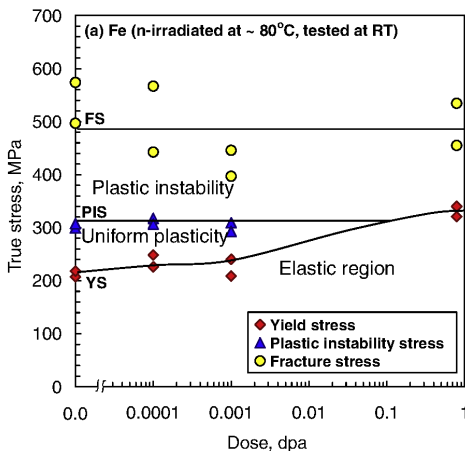
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Aços ferríticos



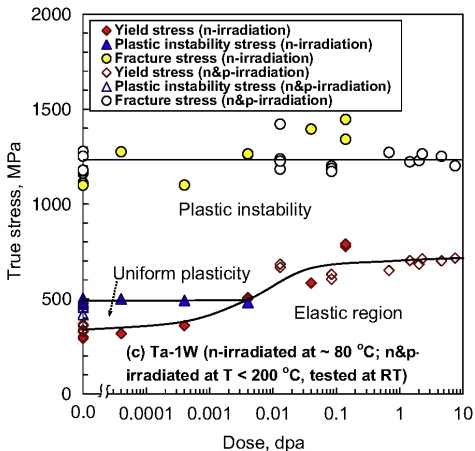
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Aços ferríticos



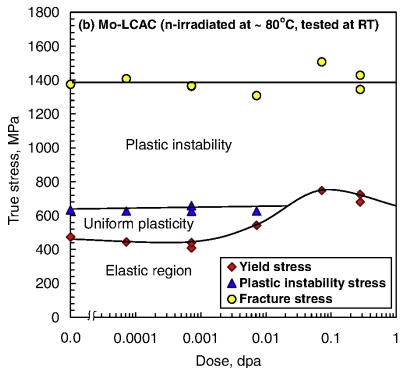
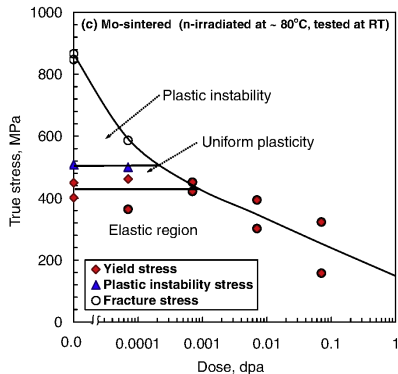
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Ligas de Tântalo



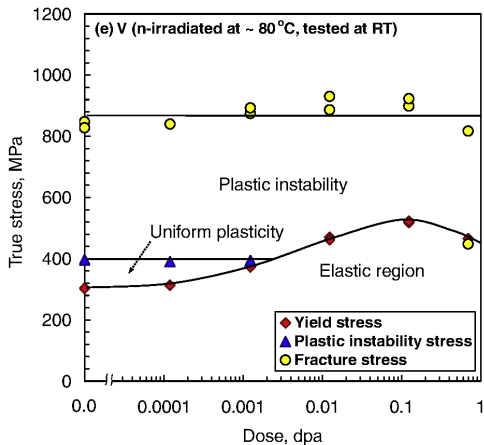
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais refratários



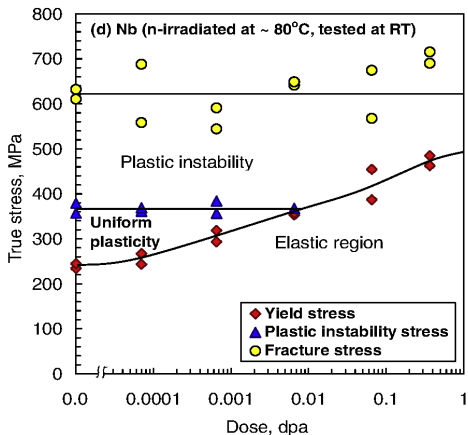
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais refratários



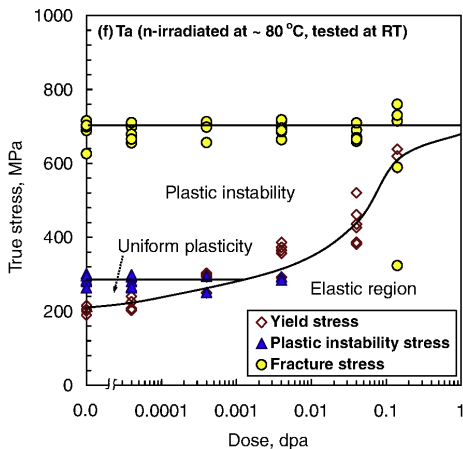
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais refratários



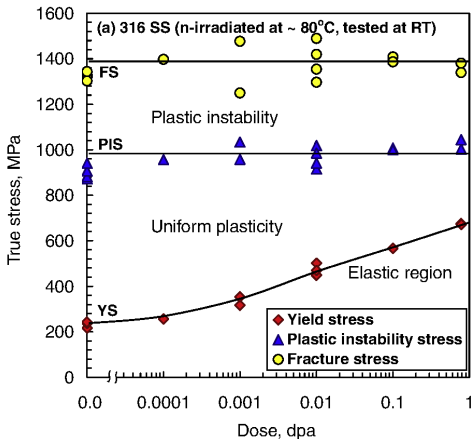
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais refratários



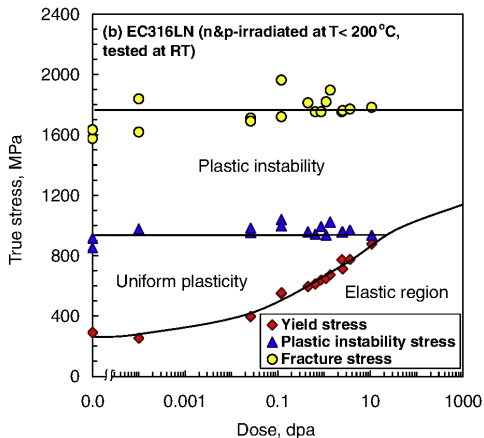
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Aços inoxidáveis



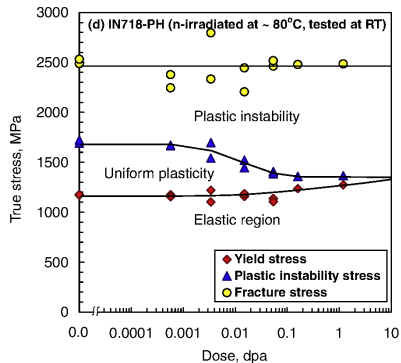
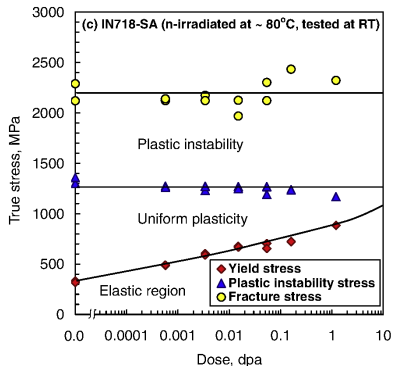
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Aços inoxidáveis



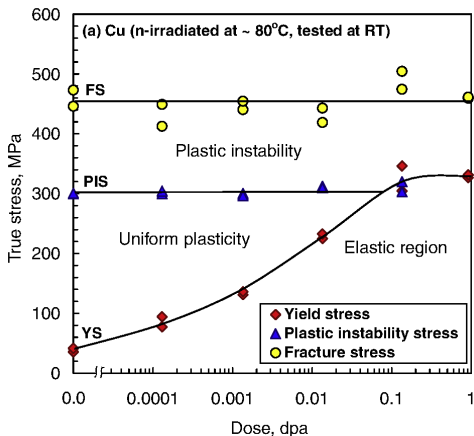
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Inconel 718



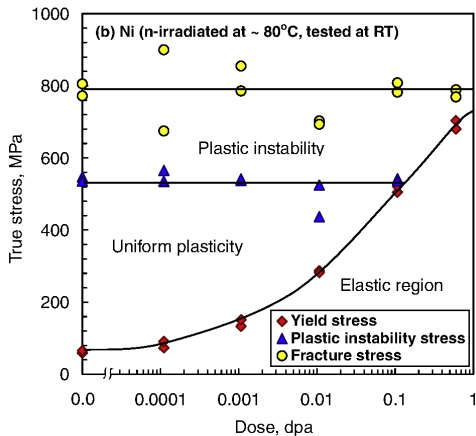
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais CFC



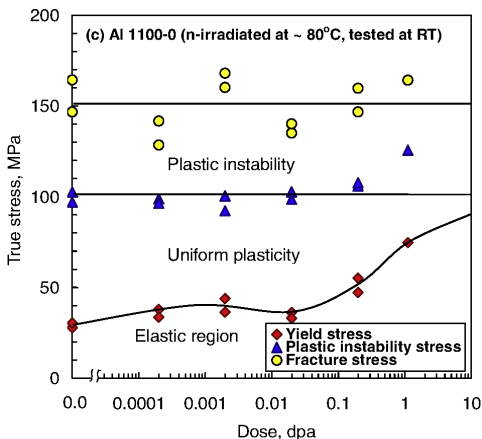
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais CFC



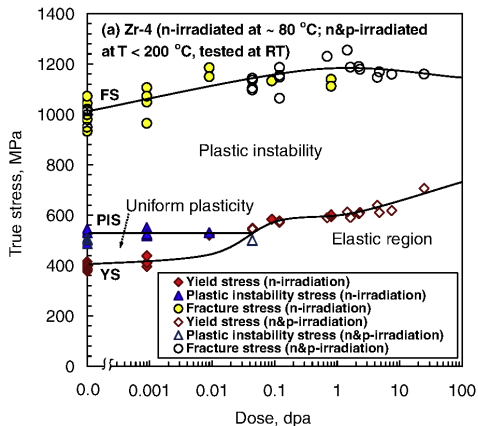
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Metais CFC



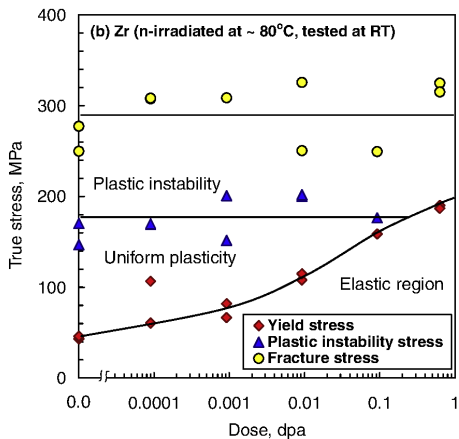
T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Zircaloy 4



T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

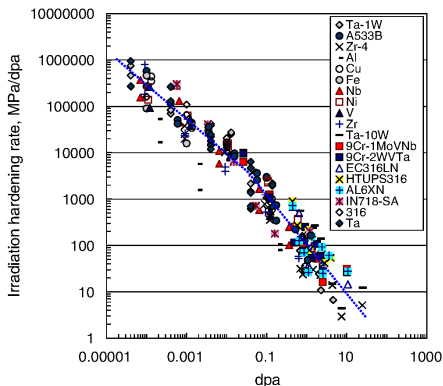
Zircônio



T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part I – Mapping macroscopic deformation modes on true stress–dose plane" *Acta Mater.* **56** (2008) 1044 – 1055.

Taxa de endurecimento por irradiação

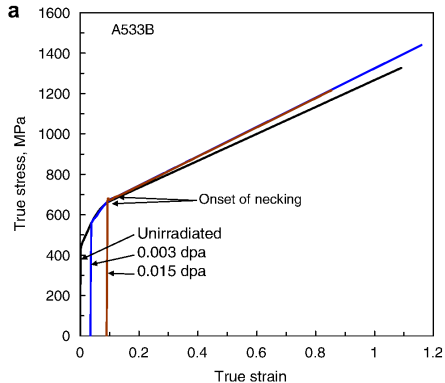
Irradiation hardening rate, IHR



$$\text{IHR} = \frac{d\sigma_e}{d(\text{dpa})}$$

T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II – Irradiation hardening, strain hardening and stress ratios" *Acta Mater.* **56** (2008) 1056 – 1064.

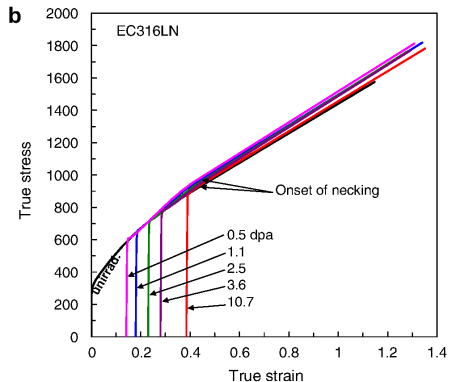
Taxa de encruamento equivalente



- a. Aço A533B
- b. Aço inoxidável EC316LN
- c. Zircaloy 4

T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II – Irradiation hardening, strain hardening and stress ratios" *Acta Mater.* **56** (2008) 1056 – 1064.

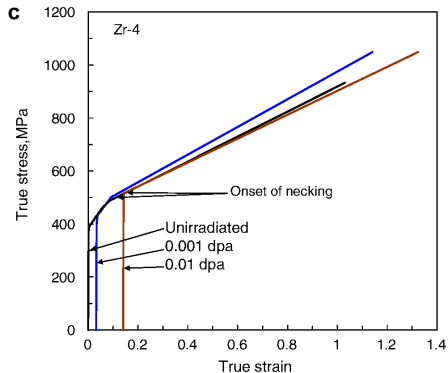
Taxa de encruamento equivalente



- a. Aço A533B
- b. Aço inoxidável EC316LN
- c. Zircaloy 4

T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II – Irradiation hardening, strain hardening and stress ratios" *Acta Mater.* **56** (2008) 1056 – 1064.

Taxa de encruamento equivalente



- a. Aço A533B
- b. Aço inoxidável EC316LN
- c. Zircaloy 4

T. S. Byun, K. Farrell, M. Li "Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II – Irradiation hardening, strain hardening and stress ratios" *Acta Mater.* **56** (2008) 1056 – 1064.