

PMT3540 - Aula 10 - Fluência

Cláudio Geraldo Schön

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

21 de novembro de 2018

Fluência sob irradiação

- Irradiação incrementa a fluência
 - Aumentando $\dot{\epsilon}_{min}$
 - Produzindo fluência em temperaturas em que ela não seria observada
- Fluência sob irradiação é compreendida no contexto de produção de defeitos de linha e do desenvolvimento da microestrutura de irradiação (surpreendentemente não há efeitos sobre os mecanismos de fluência difusionais)

Nucleação preferencial de anéis assistida por tensão

SPIN

Nucleação preferencial de anéis assistida por tensão
(*Stress-induced preferential nucleation of loops, SPIN*)

Tensões normais incentivam a nucleação de anéis em planos cristalinos bem orientados

- Anéis intersticiais são criados nos planos perpendiculares à tensão normal
- Anéis de lacunas são nucleados nos planos paralelos à tensão normal

Ambos os processos contribuem para a deformação em fluência.

Modelamento de SPIN

Seja f a fração de anéis alinhados, o número de anéis alinhados, N_{AA} , será:

$$N_{AA} = \frac{1}{3}(1 - f)N_A + fN_A$$

onde N_A é o número total de anéis produzidos.
O número de anéis não alinhados, N_{NA} será:

$$N_{NA} = \frac{2}{3}(1 - f)N_A$$

Modelamento de SPIN

Supondo que n seja o número crítico de defeitos para produzir um anel intersticial ou de lacunas, a probabilidade de formar um anel orientado (com orientação i , sendo σ_i a componente normal nessa orientação):

$$p_i = \frac{\exp\left(\frac{n\sigma_i\Omega}{k_B T}\right)}{\sum_j \exp\left(\frac{n\sigma_j\Omega}{k_B T}\right)}$$

o número de anéis orientados com a orientação i :

$$N_A^i = p_i N_A$$

Modelamento de SPIN

Assumindo três orientações ortogonais:

$$f_1 = \frac{\exp\left(\frac{n\sigma\Omega}{k_B T}\right) - 1}{\exp\left(\frac{n\sigma\Omega}{k_B T}\right) - 2}$$

$$f_2 = f_3 = 0$$

A deformação produzida pelo alinhamento dos anéis é:

$$\varepsilon = \frac{2}{3} \left(\pi r_A^2 b N_{AA} - \pi r_A^2 b N_{NA} \right)$$

onde r_A é o raio médio dos anéis e b é o vetor de Burgers.

Modelamento de SPIN

Assumindo três orientações ortogonais:

$$f_1 = \frac{\exp\left(\frac{n\sigma\Omega}{k_B T}\right) - 1}{\exp\left(\frac{n\sigma\Omega}{k_B T}\right) - 2}$$

$$f_2 = f_3 = 0$$

A deformação produzida pelo alinhamento dos anéis é:

$$\varepsilon = \frac{2}{3} \left(\pi r_A^2 b N_{AA} - \pi r_A^2 b N_{NA} \right)$$

onde r_A é o raio médio dos anéis e b é o vetor de Burgers. ou

$$\varepsilon = \frac{2}{3} f \pi r_A^2 b N_A$$

Modelamento de SPIN

A taxa de fluência é determinada tomando-se a derivada temporal:

$$\frac{4}{3}fb\pi r_A N_A \dot{r}_A$$

Considerando

$$k_B T \gg n\sigma\Omega \Rightarrow f = \frac{n\sigma\Omega}{3K_B T}$$

obtemos

$$\dot{\epsilon} = \frac{2}{9} \frac{n\sigma b\Omega}{k_B T} \rho_A \dot{r}_A$$

onde

$$\rho_A = 2\pi r_A N_A$$

é a densidade de linha de discordância devida aos anéis.

Críticas ao mecanismo SPIN

Matthews e Finnis

- Existem evidências de orientação dos anéis, mas a taxa de fluência prevista é 2 a 4 vezes maior que o observado
- Uma vez nucleado o anel, a taxa de fluência será definida apenas pela dose de radiação, ou seja, é possível haver fluência mesmo na ausência de tensão
- Se o anel for nucleado antes da tensão ser aplicada, então fluência não deveria ocorrer

Algo mais é necessário.

Absorção preferencial induzida por tensão

SIPA

Absorção preferencial induzida por tensão (*Stress-induced preferential absorption*, SIPA)

Interação dos campos elásticos de discordâncias e defeitos produzidos na cascata de dano, que levam à absorção anisotrópica dos defeitos em resposta ao estado de tensão (levando à ascensão).

SIPA

Modelo

O fluxo de difusão de intersticiais de excesso absorvidos por discordâncias em cunha com orientação j (plano extra perpendicular à direção j) e densidade ρ_j é:

$$J_j = \rho_j \Omega \left(z_i^{d,j} D_i c_i - z_l^{d,j} D_l c_l - z_i^{d,j} D_i c_i^{0,j} \right)$$

onde $z_{i,l}$ são as eficiências de absorção dos respectivos defeitos, na discordância de orientação j , $D_{i,l}$ são os coeficientes de difusão dos respectivos defeitos, $c_{i,l}$ são as concentrações de excesso dos defeitos e $c_i^{0,j}$ é a concentração de equilíbrio de intersticiais para a discordância de orientação j , definida por:

$$c_i^{0,1} = c_i^0 \exp \left(\frac{\sigma \Omega}{k_B T} \right)$$

as demais concentrações são iguais aos valores de equilíbrio.

SIPA

Modelo

A velocidade de ascensão, v_j , é dada por:

$$v_j = b\rho_j J_j$$

então

$$v_j = \frac{\Omega}{b} \left(z_i^{d,j} D_i c_i - z_l^{d,j} D_l c_l - z_i^{d,j} D_i c_i^{0,j} \right)$$

A taxa total de fluência, $\dot{\epsilon}$, é

$$\dot{\epsilon}_j = \Omega\rho_j \left(z_i^{d,j} D_i c_i - z_l^{d,j} D_l c_l - z_i^{d,j} D_i c_i^{0,j} \right)$$

SIPA

Inchamento

A taxa de fluência calculada na SIPA tem uma contribuição de inchamento propriamente dito, que pode ser calculada com:

$$\frac{dV}{V} = \frac{1}{3} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)$$

assim

$$\dot{\varepsilon}_V = \frac{\Omega}{3} \sum_{j=1}^3 \left(z_i^{d,j} D_i c_i - z_l^{d,j} D_l c_l - z_i^{d,j} D_i c_l^{0,j} \right) \rho_j$$

SIPA

Taxa de ascensão

A taxa de ascensão, $\dot{\epsilon}_A$, será dada por:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_A = & \Omega \rho_1 \left(z_i^{d,1} D_i c_i - z_l^{d,1} D_l c_l - z_i^{d,1} D_i c_i^{0,1} \right) \\ & - \frac{\Omega}{3} \sum_{n=1}^3 \left(z_i^{d,n} D_i c_i - z_l^{d,n} D_l c_l - z_i^{d,n} D_i c_i^{0,n} \right) \rho_n \end{aligned}$$

assumindo agora que $\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \frac{\rho}{3}$ e substituindo:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_A = & \frac{2}{9} \Omega \rho \left\{ \left[\Delta z_i^d D_i c_i - \Delta z_l^d D_l c_l \right] \right. \\ & \left. + D_l c_l^0 \left[z_l^{d,A} \exp \left(\frac{\sigma \Omega}{k_B T} \right) - z_l^{d,N} \right] \right\} \end{aligned}$$

onde $\Delta z_{i,l}^d = z_{i,l}^{d,A} - z_{i,l}^{d,N}$ representa a diferença da probabilidade de absorção dos intersticiais pela discordância alinhada com a tensão (representada pela letra A) em contraposição com a discordância não alinhada (representada pela letra N).

SIPA

interpretação

O primeiro termo da taxa de ascensão

$$\frac{2}{9}\Omega\rho\left(\Delta z_i^d D_i c_i - \Delta z_i^d D_i c_i\right)$$

representa a contribuição da absorção anisotrópica de intersticiais à taxa de fluência, o segundo termo

$$\frac{2}{9}\Omega\rho D_i c_i^0 \left[z_i^{d,A} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{k_B T}\right) - z_i^{d,N} \right]$$

representa a taxa de fluência devida à emissão estimulada de lacunas.

SIPA

interpretação

O primeiro termo da taxa de ascensão

$$\frac{2}{9} \Omega \rho \left(\Delta z_i^d D_i c_i - \Delta z_l^d D_l c_l \right)$$

representa a contribuição da absorção anisotrópica de intersticiais à taxa de fluência, o segundo termo

$$\frac{2}{9} \Omega \rho D_l c_l^0 \left[z_l^{d,A} \exp \left(\frac{\sigma \Omega}{k_B T} \right) - z_l^{d,N} \right]$$

representa a taxa de fluência devida à emissão estimulada de lacunas. A dependência da tensão vem da anisotropia da probabilidade de absorção dos defeitos (contribuição atérmica) e da contribuição térmica da emissão estimulada de lacunas.

Escorregamento e ascensão estimulados por irradiação

Generalização do *dislocation creep* (discordâncias bloqueadas por obstáculos, que podem ser suplantados por ascensão).

$$\dot{\epsilon}_{AE} = \frac{\epsilon v_A}{l}$$

onde ϵ é a deformação produzida quando a discordância é liberada de um dos obstáculos, v_A é a velocidade de ascensão e l é a distância entre os obstáculos remanescentes. Quando os bloqueios são causados por redes de discordâncias, pode-se associar l à densidade de discordâncias ρ_d como:

$$l = \frac{1}{\sqrt{\pi \rho_d}}$$

Escorregamento e ascensão estimulados por irradiação

Combinando:

$$\dot{\epsilon}_{AE} = \varepsilon (\pi \rho_d)^{\frac{1}{2}} v_A$$

Segundo Was, a velocidade de ascensão é dada por:

$$v_A = \frac{2}{3} \frac{\Omega}{b} \left(z_i^{d,1} D_i c_i - z_l^{d,1} D_l c_l + z_l^{d,1} D_l c_l^{d,1} \right)$$

e

$$\dot{\epsilon}_{AE} = \frac{2}{3} \frac{\Omega}{b} \varepsilon (\pi \rho_d)^{\frac{1}{2}} \left(z_i^{d,1} D_i c_i - z_l^{d,1} D_l c_l + z_l^{d,1} D_l c_l^{d,1} \right)$$

que pode ser reescrita (Mansur) como

$$\dot{\epsilon}_{AE} = \frac{4}{9} \frac{\varepsilon \Omega^2}{b} (\pi \rho_d)^{\frac{1}{2}} D_i c_i \Delta z_i^d$$

Escorregamento e ascensão estimulados por irradiação

Análise

- Was mostra que SIPA resulta em uma taxa de fluência proporcional a σ , enquanto que AE seria proporcional a σ^2
- c_i é proporcional a K_0 quando sorvedouros dominam o processo, ou proporciona, a $K_0^{\frac{1}{2}}$ nos casos dominados por recombinação
- Como a equação não envolve todas as discordâncias em cunha, fluência pode ocorrer mesmo quando não há inchamento

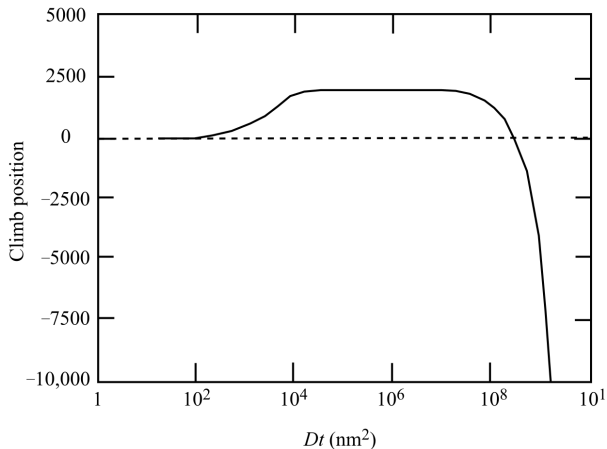
Absorção transiente induzida por escorregamento

GIPA

Os mecanismos anteriores requerem que as populações de intersticiais e lacunas estejam em estado estacionário, mas intersticiais e lacunas não são absorvidos em iguais frações, levando a um comportamento transiente → *glide-induced preferential absorption*, GIPA. A fração de lacunas é ordens de grandeza superior à de intersticiais.

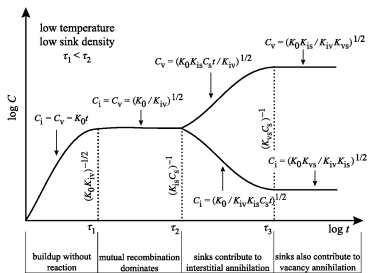
Absorção transiente induzida por escorregamento

GIPA



Absorção transitente de partida

Fluência significativa observada no início da irradiação em baixas temperaturas → absorção transitente de partida (*start-up transient absorption, STA*).
Recordando: Definição dos tempos característicos:



O número de intersticiais disponível para fluência transitente será:

$$N_i = K_0 (\tau_4 - \tau_2) - \frac{K_0}{K_{IS} C_s}$$

Fluência pela formação da cascata

Caso haja tensão presente no momento da formação da cascata de dano, essa tensão será aliviada.

$$\dot{\epsilon}_{cas} = \epsilon_e V_{cas} \alpha N \Sigma_s \phi$$

onde $\epsilon_e = \frac{\sigma}{E}$ é a deformação elástica, V_{cas} é o volume da cascata, α é o número de cascatas formadas por evento de colisão, N é a densidade de átomos, Σ_s é a seção de choque total de colisão e ϕ o fluxo de radiação.

Fluência difusional

Por quê não há efeito de irradiação?

No regime de Nabarro-Herring (NH):

$$J_l = D_l \frac{dc_l}{dx} - D_i \frac{dc_i}{dx} \approx \kappa \left(D_l \frac{c_l^+ - c_l^-}{d} - \frac{c_i^+ - c_i^-}{d} \right)$$

onde

$$c_{l,i}^{\pm} = c_{l,i}^0 \exp \left(\frac{\pm \sigma \Omega}{k_B T} \right)$$

são as concentrações de equilíbrio dos defeitos nas orientações perpendicular e paralela à tensão, d é a distância característica de difusão (normalmente o tamanho de grão) e κ é uma constante de proporcionalidade.

Fluência difusional

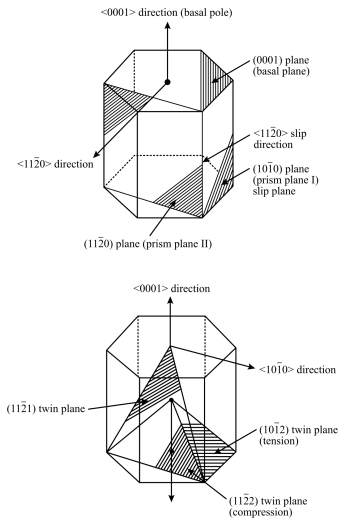
Por quê não há efeito de irradiação?

Desenvolvendo o seno hiperbólico e lembrando que $\frac{\sigma\Omega}{k_B T} \ll 1$:

$$J_I = \frac{2\kappa\sigma\Omega}{dk_B T} \left(D_I c_I^0 - D_i c_i^0 \right) \approx \frac{2\kappa\sigma\Omega}{dk_B T} \left(D_I c_I^0 \right)$$

que é a mesma equação obtida em NH, de fato a irradiação não tem efeito, porque o fluxo de NH é controlado pelas diferenças de concentração de defeitos e não pela concentração total, e as diferenças permanecem inalteradas com a irradiação.

Cristalografia do α Zr



Planos importantes:

■ Prismáticos

- (10 $\bar{1}0$)
- (11 $\bar{2}0$)

■ Piramidais

- (11 $\bar{2}1$)
- (11 $\bar{2}2$)
- (10 $\bar{1}2$)

■ Basal

- (0001)

Microestruturas de irradiação em zircônio e suas ligas

Características:

- Difusão é anisotrópica
- Distorção causada pelos intersticiais é menor que a de cristais cúbicos → maior solubilidade de elementos intersticiais (gases)
- Anéis intersticiais são mais estáveis
- Irradiação com nêutrons → anéis prismáticos (lacunas e intersticiais) do tipo $\frac{1}{3}(11\bar{2}0)$
- Temperatura e doses maiores, anéis basais com vetor de Burgers $\frac{1}{6}(20\bar{2}3)$, estabilizados por solutos em dimensões reduzidas

Outros aspectos do dano de irradiação

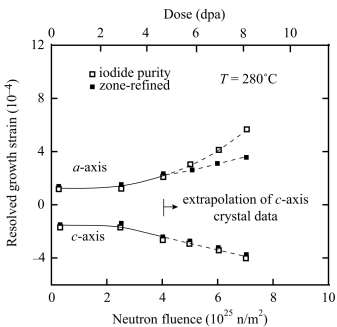
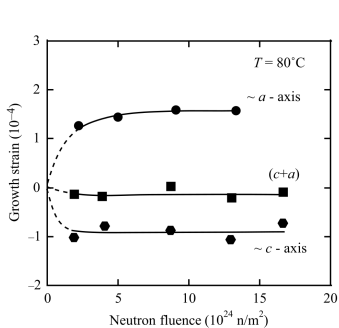
- Anéis basais são sorvedouros de lacunas e anéis prismáticos são sorvedouros de intersticiais
- Contornos de grão tem propriedades anisotrópicas
- Cavidades são estáveis quando há a presença de gases insolúveis, são observados em associação com segundas fases
- Radiação induz formação, dissolução, redistribuição de intermetálicos contendo Fe e Sn.

Distorção

Distorção induzida por irradiação (*irradiation growth*) designa alterações dimensionais observadas em Zr (e suas ligas) que mantém o volume contante (distinto, portanto, do inchamento).

- Monocristais: expansão do eixo a e contração do eixo c (em volume contante)
- Formação de anéis intersticiais nos planos prismáticos e anéis formados por lacunas condensadas no plano basal

Distorção



Distorção

Zr policristalino

- Transiente de curta duração devido à produção dos defeitos
- Estado estacionário dependente da textura
- Novo transiente de longa duração para maiores doses

Fluência por irradiação em Zr

Três componentes:

- Fluência térmica (negligível nas temperaturas dos reatores)
- Fluência por irradiação
- Contribuição da distorção