

# Diferentes Modelos Policristalinos Aplicados al Cálculo de Tensiones Intergranulares

J.W. Signorelli, P.A. Turner y R.A. Lebensohn

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) - Fac. de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura (UNR)  
Bv. 27 de Febrero 210 bis - (2000) Rosario - Argentina  
e-mail: pablo@ifir.ifir.edu.ar

Las aleaciones de zirconio son ampliamente utilizadas en la industria nuclear. El desarrollo de tensiones residuales en el material debido al trabajado mecánico y su posterior influencia en el comportamiento bajo irradiación pueden simularse por medio de modelos policristalinos. En este trabajo se emplean dos modelos policristalinos autoconsistentes: viscoplastico (VPSC)<sup>1</sup> y elastoplástico (EPSC)<sup>2</sup>, para la predicción de tensiones intergranulares y residuales en Zircaloy-2 con textura de chapa.

Zirconium Alloys are widely utilised in the nuclear industry. The residual stresses build-up during cold work and their later under irradiation behaviour are possible to simulate by means of polycrystalline models. In this work we used two self-consistent models: viscoplastic (VPSC)<sup>1</sup> and elastoplastic (EPSC)<sup>2</sup>, for the prediction of the intergranular and residual stresses in Zircaloy-2 with sheet texture.

## I. MODELOS POLICRISTALINOS AUTOCONSISTENTES

Los modelos policristalinos autoconsistentes consideran a cada grano como una inclusión inhomogénea que interacciona con un medio efectivo equivalente el cual posee las propiedades del policristal. La interacción de cada grano con dicho medio efectivo se resuelve a partir del formalismo de Eshelby para la inhomogeneidad elástica. Este formalismo puede ser extendido a distintos regimenes en los cuales la tensión y la deformación (o sus derivadas temporales) se relacionan en forma lineal o pseudo-lineal (regimenes elastoplástico, viscoplastico y viscoelástico).

### MODELO ELASTOPLÁSTICO

En la formulación EPSC la respuesta microscópica es descrita a través de la ecuación constitutiva para el cristal simple. Esta ecuación relaciona la velocidad de tensión  $\dot{\sigma}$  y la velocidad de deformación  $\dot{\epsilon}$ . La componente plástica a la velocidad de deformación resulta de la suma de las contribuciones de cada sistema de deformación activo:

$$\dot{\sigma} = C \left( \dot{\epsilon} - \sum_s m^s \dot{\gamma}^s \right) \quad (1)$$

donde  $C$  es el tensor de constantes elásticas del cristal,  $m^s$  y  $\dot{\gamma}^s$  son tensor de Schmid y la velocidad de deformación de corte simple asociados a cada sistema de deformación. Hutchinson<sup>2</sup> muestra que la expresión (1) puede reescribirse en forma pseudo-lineal y que además es posible proponer una relación análoga a nivel macroscópico:

$$\dot{\sigma} = L^s \dot{\epsilon} \quad (2)$$

$$\dot{\Sigma} = L \dot{E} \quad (3)$$

donde  $L^s$  y  $L$  son los módulos elastoplásticos instantáneos micro- y macroscópico, respectivamente.

### MODELO VISCOPLÁSTICO

En la formulación VPSC la ecuación constitutiva a nivel microscópico relaciona la velocidad de deformación  $\dot{\epsilon}$  y la tensión  $\sigma$ . A diferencia de EPSC, en este modelo todos los sistemas de deformación plástica son activos, aunque sólo contribuyen significativamente aquellos para los cuales la tensión de corte resuelta sea próxima al valor de la tensión de corte crítica. Las ecuaciones constitutivas micro- y macroscópica de la formulación son:

$$\dot{\epsilon}_i = \left[ \dot{\gamma}_0 \sum_s^N \frac{m_i^s m_j^s}{t_c^s} \left( \frac{m_k^s s_k'}{t_c^s} \right)^{n-1} \right] s_j' = M_{ij}^{c(sec)} s_j'$$

$$\dot{E}_i = M_{ij}^{(sec)} (\Sigma') S_j' \quad (4,5)$$

donde  $M^{(sec)}$  es el módulo viscoplastico secante. La resolución del problema autoconsistente permite obtener los estados macroscópico y locales de velocidad de deformación y de tensión deviatoria. El estado de tensión de Cauchy se obtiene adicionando la presión. La presión macroscópica resulta de las condiciones de borde y el estado de tensión deviatorio. Los desvíos locales de presión se calculan con el formalismo de la función de Green (Molinari et al.<sup>3</sup>).

## II. APLICACIÓN Y RESULTADOS

En primer lugar se simuló con el modelo VPSC el desarrollo de textura asociado a un proceso de laminación de Zircaloy-2 correspondiente a una reducción del 63%. Se consideraron los siguientes modos de deformación: deslizamiento prismático (PR<a>) y piramidal (PY<c+a>), maclado de tracción (TTW) y de compresión (CTW). El conjunto de tensiones críticas relativas es:  $\tau_{PR<a>}=1.0$ ,  $\tau_{PY<c+a>}=3.5$ ,  $\tau_{TTW}=1.75$  y  $\tau_{CTW}=3.0$  (Signorelli<sup>4</sup>). La textura así obtenida (Fig.1) reproduce satisfactoriamente la textura experimental. La

figura de polos basales muestra una elevada concentración de los mismos en el plano normal-transversal (ND-TD), ubicándose el máximo a 30-35° de inclinación respecto de la dirección normal. Debido a ello, en adelante, nos referiremos a granos cuya orientación basal se encuentre en este plano.

El cálculo de tensiones intergranulares (en carga y residuales) se ha realizado utilizando ambos modelos. Las mediciones por difracción de espaciamentos cristalinos pueden contrastarse con el cálculo del promedio pesado de la deformación elástica normal a un dado plano cristalino sobre el conjunto de granos que satisfacen la condición de difracción en una dada dirección de observación.

Ambos modelos son cualitativamente diferentes: el modelo VPSC sólo considera la componente plástica de deformación despreciando la contribución elástica, mientras que en el EPSC ambas componentes contribuyen a la deformación total. Por otro lado, el modelo EPSC no considera la no linealidad de  $\dot{\epsilon}$  con  $\sigma$ , la cual sí es tenida en cuenta en el modelo VPSC. Sin embargo, bajo ciertas condiciones, puede realizarse una comparación entre las tensiones intergranulares predichas por cada uno de ellos. En el caso VPSC, las tensiones en carga se obtienen directamente del modelo mientras que para el cálculo de las tensiones residuales, se ha supuesto que el material "recupera" sus propiedades elásticas previo a la descarga. Por su parte, en el caso EPSC, se ha supuesto que un 1.5% de deformación basta para que el material alcance el estado estacionario (deformación totalmente plástica) y, por lo tanto, la influencia de las tensiones residuales de origen térmico se hace despreciable (Signorelli <sup>4</sup>). Como textura inicial del cálculo EPSC se adoptó la textura final obtenida con el modelo VPSC.

En la Fig.2 se grafican la tensión interna en carga normal a planos basales junto con la proyección sobre dicho planos del estado de tensión macroscópico predichas por ambos modelos en función de la inclinación respecto de ND. Si bien ambos modelos predicen perfiles de tensiones similares, se aprecia: a) la distribución macroscópica de tensión predicha por el modelo VPSC es menor en valor absoluto que la calculada con el modelo EPSC. Esto indica que el primero de estos modelos predice un material plásticamente más blando que lo que resulta del segundo; b) los desvíos de las tensiones en los granos, respecto del estado macroscópico resultan en general opuestos, salvo en una región cercana a la orientación del máximo basal (30° respecto de ND).

La menor tensión macroscópica resultante del cálculo con el modelo VPSC respecto de la obtenida con el EPSC puede ser explicada en términos de la actividad plástica predicha por ambos modelos. Mientras que con VPSC resulta un 70% de actividad prismática y sólo un 30% de actividad de modos de tipo  $\langle c+a \rangle$ , EPSC predice un 55% de actividad de dichos modos  $\langle c+a \rangle$  que requieren una tensión mayor para ser activados.

Referente a los desvíos en carga, en la Fig.3 se muestra la deformación elástica producida por el desvío en tensión en la dirección normal al plano basal en el estado de carga del material. El perfil de deformaciones en ambos casos (EPSC y VPSC) presenta un estado de deformación compresiva para direcciones  $\langle c \rangle$  entre 20° y 40° grados de inclinación respecto ND. En la dirección normal ambos modelos predicen estados opuestos, para EPSC se obtiene una deformación de aprox.  $+10 \cdot 10^{-4}$  mientras en VPSC la deformación es compresiva  $-4 \cdot 10^{-4}$ . Para inclinaciones mayores a 50° se tiene una deformación positiva en el caso VPSC y negativa al considerar el modelo EPSC.

Posteriormente a la carga se realiza la descarga para ambos casos con la formulación EPSC. La descarga del material presenta una insipiente actividad plástica, producto del deslizamiento prismático. Sin embargo, las predicciones no se modifican substancialmente al forzar una descarga totalmente elástica. La descarga del material debido a su cuasi-isotropía elástica modifica ligeramente los desvíos en carga. En la Fig.4 se grafican las deformaciones residuales predichas por las diferentes formulaciones. En el caso VPSC se destaca el comportamiento de los granos cuyas direcciones  $\langle c \rangle$  se sitúan en cercanías de la dirección normal pasando de un estado compresivo a un estado de deformación nulo o ligeramente positiva en la normal.

Las deformaciones residuales calculadas a través de ambos modelos difieren cualitativamente. Este hecho puede ser explicado en términos de la magnitud de la interacción entre grano y matriz, intrínseca de cada modelo. Dado que el modelo EPSC impone estados de deformación total microscópicos cercanos al estado macroscópico, las deformaciones elásticas residuales corresponden a la diferencia entre la capacidad de cada grano para deformar plásticamente en una dada dirección con respecto a la deformación plástica de la matriz. Por su parte, el modelo VPSC, al tender a un estado más uniforme de tensiones, da como resultado una distribución de deformaciones elásticas residuales cuya magnitud depende de la capacidad de cada grano de deformar plásticamente en dicha dirección: cuanto mayor es la deformación plástica de un grano, mayor es la deformación residual correspondiente.

### III. CONCLUSIÓN

- La formulación elastoplástica (EPSC) provee valores de deformaciones elásticas residuales opuestas de las que resultan de la aplicación de una formulación viscoplástica (VPSC).
- El perfil de deformaciones residuales sobre planos basales resultante del modelo EPSC puede ser explicado en términos de la facilidad que poseen los granos orientados en una dada dirección respecto de la deformación plástica sufrida por la matriz en dicha dirección.
- Las diferencias entre ambos modelos autoconsistentes pueden ser debidas no sólo a que responden a diferentes regímenes de deformación

sino también a la rigidez de la interacción intrínseca resultante de ambas formulaciones.

- Resultados concluyentes acerca de la validez de las predicciones de ambas formulaciones requieren de un estudio sistemático del efecto de la textura y del conjunto de tensiones críticas. Además, la validación de los modelos requiere datos experimentales sobre muestras en condiciones bien caracterizadas.

## REFERENCIAS

- 1- Lebensohn, R.A. and Tomé, C.N., Mat. Sci. Engng. **A175** 71(1994).
- 2 - Hutchinson, J.W., Proc. Roy. Soc. Lond. **A319** 247 (1970).
- 3 - Molinari et al., Acta Metall. **37** (1987) 2983.
- 4 - Signorelli, J.W., Trabajo Final Lic. en Física, FCElyA (UNR) (1995).

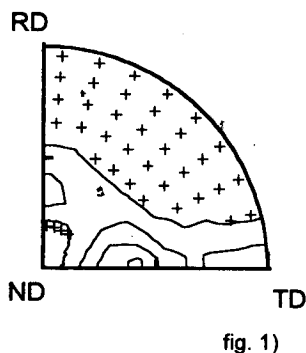


Figura 1: Figura de polos basales correspondiente a una reducción de 63% simulada con el modelo VPSC

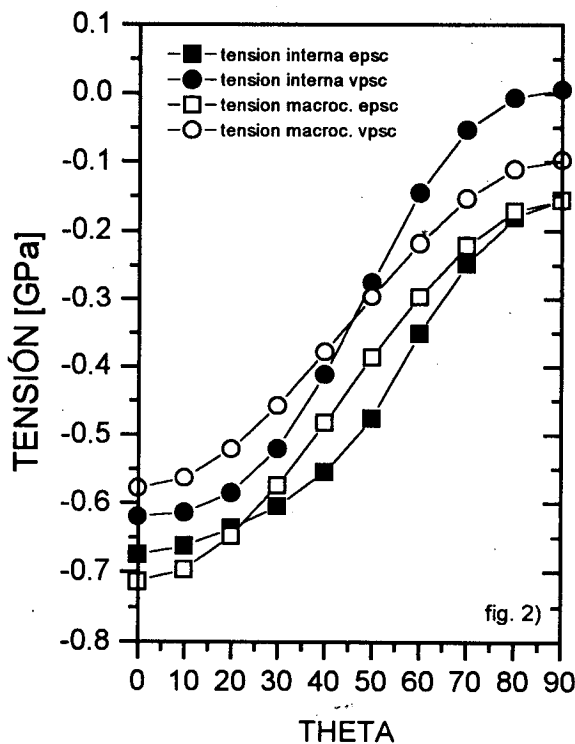


Figura 2: Tensión interna en carga normal a planos basales y proyección de la tensión macroscópica predicha por ambos modelos

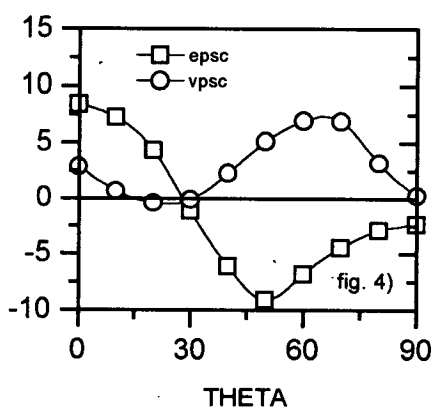
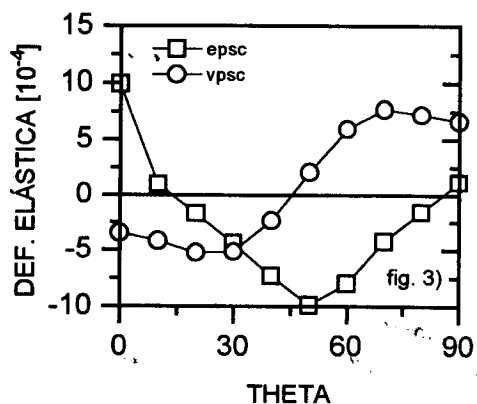


Figura 3: Deformación elástica producida por los desvíos en tensión en la dirección normal al plano basal en el estado de carga predicha por ambos modelos. Figura 4: Deformaciones residuales obtenidas a partir de ambas formulaciones.