

ESTUDIO ATOMÍSTICO DE LA INFLUENCIA DE LA TEXTURA EN LAS PROPIEDADES MECÁNICAS DE ZR NANOPOLICRISTALINO

Graciela Bertolino^{a,b}, Carlos Ruestes^{a,b}, Margarita Ruda^b y Diana Farkas^c

^aUniversidad Nacional de Cuyo – CONICET, Argentina

^bInstituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche, Argentina, bertolin@cab.cnea.gov.ar,
ruda@cab.cnea.gov.ar

^cVirginia Tech, Estados Unidos, diana@vt.edu

Resumen. Para estudiar el efecto de la textura en las propiedades mecánicas del Zr hcp policristalino con granos de dimensiones nanométricas, se realizaron simulaciones de dinámica molecular (DM). Se utilizaron potenciales de Zr del tipo átomo embebido (EAM). Los policristales tubulares se generaron con una teselación de Voronoi con diferentes orientaciones cristalinas, algunas de ellas con textura predefinida y otras con orientaciones completamente al azar. Todas las muestras fueron generadas con cincuenta granos y geometría autosimilar. Se prestó especial consideración a las muestras con textura del tipo material laminado, donde la mayoría de los granos se orientan preferencialmente con el eje [0001] perpendicular a la dirección de laminación y paralelo a la normal de la chapa. De manera análoga se obtuvieron muestras con los ejes del tipo {1100} paralelos a la normal de la muestra. Ambos casos se compararon con las muestras sin textura preferencial. Con todas ellas se realizaron ensayos numéricos de tracción y compresión a 300K, de los cuales se obtuvieron curvas de tensión-deformación. Estas curvas mostraron la influencia de la orientación preferencial en el límite de fluencia y la falta de simetría entre las respuestas en tracción y en compresión.

Se analizaron los mecanismos de deformación en función de la orientación cristalina y la tensión aplicada. Para ello se utilizó el método de análisis de vecinos comunes (CNA) que permite identificar y visualizar la estructura cristalina de los átomos. Dependiendo de la orientación, se observó la activación de sistemas de deslizamiento basales y prismáticos y la formación de fallas de apilamiento, así como la aparición de distintas configuraciones de maclas en compresión. Se compararon estos resultados con evidencia experimental para evaluar la validez del potencial EAM utilizado.