

Modelagem computacional aplicada à análise do gradiente de tensões superficiais

Vladimir Ivanovitch Monin

Joaquim Teixeira de Assis

Susana Marrero Iglesias

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico

CP 972825 – 28630-050 – Nova Friburgo, RJ, Brasil

E-mail: joaquim@iprj.uerj.br.br

Resumo: O estudo do gradiente de tensão superficial é um dos mais importantes problemas teóricos e experimentais em mecânica, especialmente no caso da análise de tensões superficiais que surgem após vários tipos de tratamentos superficiais, como: processamento por laser ou tecnologia de implantação iônica. As dificuldades nessa área estão diretamente relacionadas à não completude da metodologia desenvolvida para ambas as técnicas teóricas e experimentais. A simulação computacional e os métodos numéricos nos dão a possibilidade de resolver esses problemas da determinação dos parâmetros do gradiente de tensão. O objetivo desse trabalho foi desenvolver uma metodologia para a determinação dos parâmetros do gradiente de tensão usando a simulação computacional das linhas de difração e a adaptação desta ao método experimental de medida pela técnica de difração de raios X. A metodologia desenvolvida é baseada na simulação dos perfis de difração distorcidos pelo gradiente de tensão superficial. A análise dessas distorções, caracterizadas pelo deslocamento e alargamento do perfil, permitiu que se encontrasse uma relação entre os dados experimentais de difração e os parâmetros do gradiente de tensão. Foram estudados os gradientes de tensão formados por distribuições lineares e exponenciais nas camadas superficiais do material.

1. INTRODUÇÃO

Os tratamentos para modificações das propriedades físico-mecânicas das superfícies de materiais por tecnologias

modernas, como têmpera superficial por laser ou implantação iônica, são acompanhadas pelo surgimento de tensões residuais caracterizadas por alto nível da tensão e do gradiente. A Figura 1 mostra vários tipos de distribuições de tensões residuais que podem ser encontrados nas camadas superficiais dos metais e ligas após os tratamentos mencionadas acima.

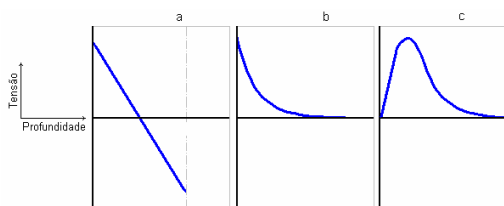


Fig.1 Vários tipos das distribuições de tensões superficiais: a – linear; b – exponencial; c – polinomial.

A principal particularidade das distribuições de tensões mostradas na Fig.1 é que a camada de localização de tensões é muito fina e o valor do gradiente neste caso é alto. A camada fina de localização de tensões com gradiente alto cria um grande problema tanto na parte de análise teórica quanto na parte de medidas experimentais.

Um dos métodos mais utilizados e confiáveis na prática é o método das medidas de tensões por difração de raios X [1,2]. A penetração dos raios X nos materiais, inclusive metais e ligas, pode variar de unidades até dezenas de micrometros. Nestas condições o valor de tensão medida por difração de raios X é a

média através da camada efetiva de penetração dos raios X. Claro que no caso de gradiente alto a diferença entre o valor verdadeiro de tensão na superfície e o valor médio medido por difração de raios X pode ser significativa.

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia de medidas de tensões por difração de raios X que permita obter o valor verdadeiro de tensão na superfície tratada e do gradiente e que dá a possibilidade de avaliar a espessura efetiva de ação de tensões residuais nas camadas superficiais.

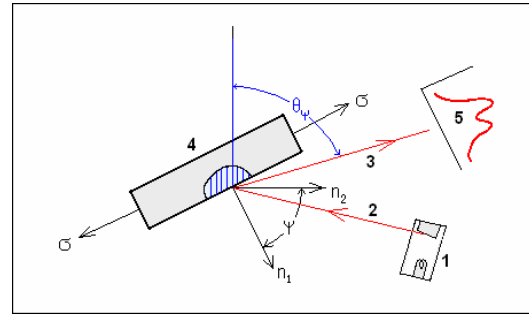


Fig.2 - Esquema de medida de tensão por difração de raios X: 1 – tubo de raios X; 2,3 – raio X incidente e difratado; 4 – amostra analisada; 5 – perfil da linha de difração.

2. METODOLOGIA

Medições das tensões mecânicas pelo método de $\text{sen}^2\psi$

O principal método de medidas de tensões por difração de raios X é o método do “ $\text{sen}^2\psi$ ”, que é baseado na medida do ângulo de difração que caracteriza a posição angular da linha de difração [1]. A Fig.2 mostra o esquema das medidas pelo método do “ $\text{sen}^2\psi$ ”.

O método do “ $\text{sen}^2\psi$ ” [3] é baseado na utilização da equação da teoria de elasticidade para deformação $\epsilon_{\phi,\psi}$ em direção arbitrária. No caso do sistema de coordenadas polares esta equação para $\epsilon_{\phi,\psi}$ é

$$\epsilon_{\phi,\psi} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{\phi} \text{sen}^2\psi - \frac{\nu}{E} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (1)$$

onde ϕ é o ângulo azimutal e ψ é o ângulo polar; E , ν são as constantes de elasticidade do material; σ_1 , σ_2 são tensões principais e σ_{ϕ} é a componente da tensão medida.

De outra forma, a deformação $\epsilon_{\phi,\psi}$ pode ser expressa em termos da difração interpretada pela lei de Bragg:

$$2d \cdot \text{sen}\theta = \lambda \quad (2)$$

onde d é a distância interplanar da rede cristalina, θ é o ângulo de difração e

$$\epsilon_{\phi,\psi} = \frac{\Delta d}{d} = -\text{ctg}\theta \cdot \Delta\theta \quad (3)$$

λ é o comprimento de onda do raio X. Após a diferenciação da lei de Bragg podemos obter:

Igualando as equações (1) e (3), podemos obter a equação para o ângulo de difração θ_{ψ} mostrado na Fig.2:

$$\theta_{\psi} = \theta_0 + \sigma_{\phi} \frac{(1+\nu)}{E} \frac{\text{sen}^2\psi}{\text{ctg}\theta} - \frac{\nu}{E} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (4)$$

Pode-se ver que θ_{ψ} é uma função linear em relação ao $\text{sen}^2\psi$ e o valor de tensão pode ser determinado como:

$$\sigma_{\phi} = \frac{E}{1+\nu} \text{ctg}\theta (\theta_{\phi=90} - \theta_{\phi=0}) \quad (5)$$

Onde $(\theta_{\psi=90} - \theta_{\psi=0})$ é a inclinação da linha reta da função $\theta_{\psi} = f(\text{sen}^2 \psi)$. Fig.3 ilustra a dependência de ângulo de difração θ_{ψ} em função de $\text{sen}^2 \psi$ para vários tensões.

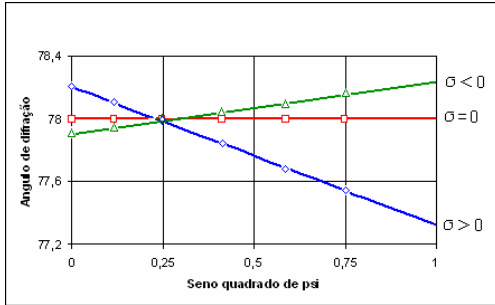


Fig.3 Os gráficos de $\theta_{\psi} = f(\text{sen}^2 \psi)$ do método de “ $\text{sen}^2 \psi$ ”.

Variações do ângulo ψ se realizam por inclinações da superfície da amostra analisada em relação de feixe de raios X incidente (veja Fig.1). A inclinação total $(\theta_{\psi=90} - \theta_{\psi=0})$ é determinada por regressão linear e o valor da tensão no método de “ $\text{sen}^2 \psi$ ” pode ser calculado pela Eq. 5.

Método de $\text{sen}^2 \psi$ no caso de gradiente de tensões.

A influência do gradiente de tensões no método de “ $\text{sen}^2 \psi$ ” pode ser analisada pela simulação do perfil da linha de difração pela modelagem computacional desenvolvida nos trabalhos [4]. Esta metodologia é baseada na interpretação da linha de difração de raios X como soma dos perfis refletidos separadamente por seqüência das camadas superficiais. A intensidade da cada perfil individual depende de absorção de raios X no material e é expressa pela seguinte equação [2]:

$$I_{dif} = \alpha I_0 e^{-\mu z} = \alpha I_0 e^{-\mu \left(\frac{1}{\cos(\psi+90-\theta)} + \frac{1}{\cos(\psi-90+\theta)} \right)} \quad (6)$$

A posição angular dos perfis individuais é determinada pela equação (4), onde a tensão σ_{ψ} é substituída por uma função de distribuição de tensões $\sigma(t)$ caracterizada por um gradiente [3]. A equação (4) pode ser escrita neste caso como:

$$\theta_{\psi} = \theta_0 + \sigma(t) \frac{(1+\nu) \text{sen}^2 \psi}{E \text{ctg} \theta} - \frac{\nu}{E} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (7)$$

A figura 4 mostra a estrutura do perfil final da linha de difração para o caso de tensão superficial constante. Pode-se ver que a forma e a posição dos todos os perfis neste caso são iguais.

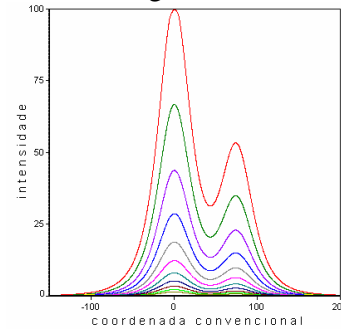


Fig. 4 Estrutura do perfil da linha de difração simulado por modelagem computacional.

No caso de tensões com gradiente, as posições dos perfis individuais variam dependendo da função de distribuição de tensões $\sigma(t)$. A Fig.5 mostra as posições e as intensidades dos perfis individuais e dá a posição e a forma do perfil final neste caso.

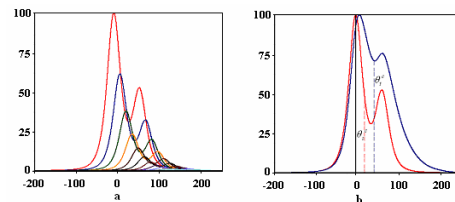


Fig.5 Estrutura do perfil da linha de difração simulado por modelagem computacional:

a – perfis individuais; b – perfil final sem gradiente (vermelho) e com gradiente (azul).

Como pode ser visto na fig. 5, o gradiente de tensões influencia significativamente na posição e na forma da linha de difração (Fig.5b).

Resultados da metodologia de análise de tensões com gradiente

O ângulo polar ψ encontrado nas equações (6) e (7) não participa evidentemente na formação do perfil final no caso tensões com gradiente. Esta influência é ligada à dependência da penetração de raios X, da inclinação de feixe incidente á superfície do material analisado ou dependência de ângulo polar ψ . Realmente, com o aumento do ângulo polar ψ diminui-se a profundidade de penetração dos raios X no material e isso tem que influir na posição e na forma do perfil da linha de difração. A metodologia de simulação do perfil da linha de difração por modelagem computacional [4] permite analisar esta dependência. A Fig.6 apresenta os resultados da determinação dos valores dos ângulos de difração para aço quando nas camadas superficiais atuam as tensões residuais distribuídas linearmente, pela seguinte equação:

$$\sigma(t) = \sigma_0 - kt \quad (8)$$

Onde a tensão na superfície $\sigma_0 = 500MPa$ e o gradiente $k = 100 MPa/\mu m$.

De acordo com equação (5) do método de “ $sen^2 \psi$ ”, o valor de tensão calculado pela inclinação da linha reta 3 é igual a $\sigma = 230 MPa$. Em resultado o pesquisador que realiza as medidas de tensões pode tirar uma conclusão falsa que na superfície do aço analisado atuam as tensões iguais a 230 MPa, mas o valor de tensão verdadeira na superfície do aço é $\sigma_0 = 500MPa$. Então o problema é como fazer as correções das tensões com gradiente medidas pelo método de difração

de raios X. A primeira questão é como descobrir a presença do gradiente na superfície do material analisado.

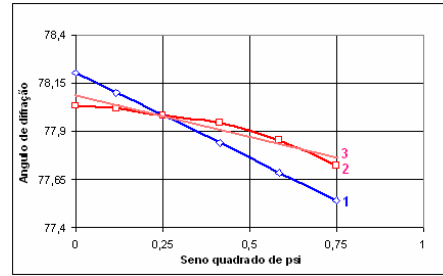


Fig.6 - Dependências $\theta_\psi = f(\text{sen}^2 \psi)$ obtidas pelo método de “ $sen^2 \psi$ ” para aço: 1 – linha reta corresponde a tensão constante $\sigma_0 = 500MPa$; 2 – os dados correspondentes a tensão com gradiente $k=100 MPa/\mu m$; 3–linha reta obtida pela regressão linear para os dados da curva 2.

Para obter a resposta para esta questão o pesquisador tem que analisar o alargamento da linha de difração que pode ser causado pela presença do gradiente alto de tensão superficial. A Fig.5b e os resultados apresentados no trabalho [4] mostram que no caso de gradiente de tensões superficiais existe um alargamento significativo da linha de difração. Esse pode ser um critério principal da existência do gradiente no estado de tensões medido pela difração de raios X. É importante notar que o alargamento das linhas de difração é causado somente pelo gradiente de tensões e não tem dependência de valor de tensão σ_0 . O alargamento pode ser caracterizado pela largura integral da linha de difração, que é a área ocupada pela linha de difração dividida pela intensidade máxima do pico. O valor do alargamento b pode ser determinado como diferença das larguras integrais das linhas de difração para a amostra com gradiente $B_{med.}$ e sem gradiente B_0 ou $b = B_{med.} - B_0$. Mas não temos necessidade de analisar uma amostra padrão livre do gradiente de tensão porque existe uma dependência da largura integral de ângulo polar ψ

permitindo resolver o problema do conhecimento de B_0 . Na Fig.7 é mostrada esta situação [4].

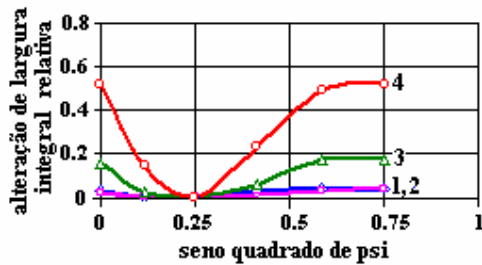


Figura 7. Simulação da influência do gradiente na largura integral da linha de difração em função de $\text{sen}^2\psi$: 1- $\sigma(t)=500-25t$; 2- $\sigma(t)=500*\exp(-0.0515t)$; 3- $\sigma(t)=1000-50t$; 4- $\sigma(t)=2000-100t$;

Analisando os gráficos na Fig.7 podemos concluir que o alargamento máximo é observado nos ângulos $\psi=0^0$ e $\psi=60^0$ e existe um ponto com ângulo $\psi=30^0$ onde a largura integral é não sensível a influência do gradiente de tensão. Por isso, o alargamento da linha de difração $b = B_{med.} - B_0$ pode ser substituído por:

$$b = \mathbf{B}_{med.}^{\psi=0} - \mathbf{B}_{med.}^{\psi=30} \quad (9)$$

A equação (9) permite utilizar esta característica para determinar o valor do gradiente k na função de distribuição de tensões nas camadas superficiais do material.

Um gráfico obtido pela modelagem computacional mostrado na Fig.7 apresenta a relação entre o alargamento da linha de difração b e o valor do gradiente de tensão k .

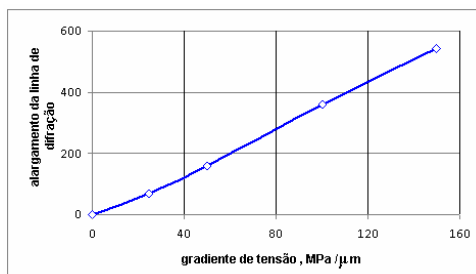


Fig.8 Alargamento da linha de difração em função do valor do gradiente.

Este gráfico pode ser considerado como um gráfico de calibração para determinação o valor do gradiente k nas medidas de tensões no aço com a utilização da radiação de $K\alpha - Cr$.

O conhecimento do valor de gradiente k é muito importante, mas não é suficiente para caracterizar completamente o estado de tensões superficiais. O problema foi ilustrado na Fig.6 e se revela como grande diferença entre o valor de tensão medida igual a $\sigma_{med.} = 230 MPa$ e o valor de tensão na superfície igual a $\sigma_0 = 500MPa$. Assim como fazer as correções das tensões $\sigma_{med.}$ medidas pelo método do “ $\text{sen}^2\psi$ ” para o caso de existência do gradiente. Este problema pode ser resolvido com a utilização de outro gráfico de calibração que estabelece as relações entre o valor de tensão medida e o valor de tensão verdadeira. O gráfico foi obtido pela construção através de modelagem computacional das dependências $\theta_\psi = f(\text{sen}^2\psi)$ e utilização do método de “ $\text{sen}^2\psi$ ” para vários valores do gradiente k e da tensão σ_0 .

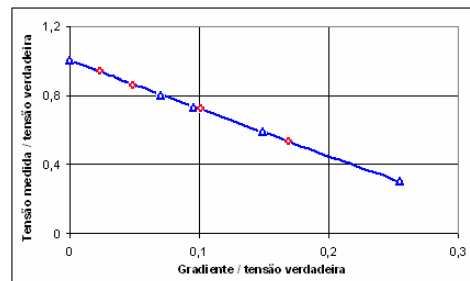


Fig.9 - Gráfico da relação entre a tensão medida $\sigma_{med.}$, tensão na superfície σ_0 e o valor do gradiente k : os pontos vermelhos correspondem a $k=50MPa/\mu m$ e os azuis - a $k=100MPa/\mu m$.

Discussão

O gráfico na Fig.9 é a base para fazer as correções dos valores de tensões

medidas pelo método de “ $\text{sen}^2 \psi$ ” no caso de influência do gradiente de tensões superficiais. As correções se realizam pelo método de aproximações sucessivas após a determinação do gradiente k pela análise do alargamento da linha de difração com o gráfico apresentado na Fig.7.

No eixo horizontal do gráfico da Fig. 9 ficam os valores $\frac{k}{\sigma_0}$ e no eixo vertical os valores de coeficiente de correção $\alpha = \frac{\sigma_{med.}}{\sigma_0}$. Na primeira fase de correção pelo método de aproximações sucessivas substituindo o valor $\frac{k}{\sigma_0}$ por $\frac{k}{\sigma_{med.}}$ podemos achar o primeiro valor do coeficiente α e fazer a correção como $\sigma_0 = \frac{\sigma_{med.}}{\alpha}$. O procedimento seguinte é típico para o método de aproximações sucessivas, com o novo valor de σ_0 se repete a determinação do valor $\frac{k}{\sigma_0}$. Acha-se então um novo coeficiente de correção e calcula-se o novo valor σ_0 e se repete este processo até que este valor se aproxime do valor verdadeiro de tensão σ_0 .

Conclusões

No presente trabalho a modelagem computacional foi utilizada para o desenvolvimento de uma metodologia de medidas de tensões superficiais caracterizadas por alto gradiente. A metodologia é aplicada para o método de tensometria por difração raios X e permite obter o valor de gradiente de tensão e o valor verdadeiro de tensão na superfície tratada.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao suporte financeiro dado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e pela Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do

Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) para desenvolvimento desta pesquisa.

Referências

1. I.S. Noyan, J.B. Cohen, Residual Stress. Measurement by diffraction and interpretation, Springer Verlag, New York, Berlin, 1987.
2. V. Hauk, Structural and Residual Stress Analysis by Nondestructive Methods, Elsevier, Amsterdam, 1997.
3. S.P.Timoshenko, N.J.Goodier, Theory of Elasticity, McGraw-Hill, New York, 1980.
4. V.I.Monin, J. T.Assis, S.Philippov. Study of Stress Gradients using Computer Simulation of Diffraction Data, Spie, Bellingham, USA, v. 5400, p. 196-199, 2004.