

Simulación de Desarrollo de Texturas de Materiales Bifásicos por Métodos Autoconsistentes

R. E. Bolmaro y R.A. Lebensohn

Instituto de Física Rosario - Fac. de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. (CONICET-UNR). Universidad Nacional de Rosario. Bv. 27 de Febrero 210 bis. Rosario. 2000. Argentina.

e-mail: bolmaro@ifir.ifir.edu.ar.

La textura y deformación de cada fase, en materiales bifásicos codeformables, ha sido muy estudiada en el pasado¹. Un comportamiento no monótono en el desarrollo de texturas se ha observado experimentalmente en muchos de esos sistemas². En el presente trabajo se utiliza un modelo viscoplastico autoconsistente de 2 sitios (2S-VPSC)^{3,4} para simular el desarrollo de texturas de compuestos Ag-Ni. En este modelo existe una interacción muy fuerte entre dos granos adheridos cuyos volúmenes son proporcionales a la fracción de volumen de ambas fases del compuesto. Ambos granos interactuantes se hallan embebidos en un medio equivalente homogéneo (MEH) que posee las propiedades promedio del compuesto. La importancia relativa de ambas interacciones se evalúa por comparación de los resultados obtenidos mediante la simulación y las texturas experimentales obtenidas para compuestos 50%Ag-50%Ni para compresión simple y laminado. No existe correlación cristalina entre ambas fases sino solamente morfológica y volumétrica.

Two-phase co-deformable composites have been largely studied in the past, regarding texture development and strain sharing of both phases¹. A non monotonically linear development of texture intensities has been shown to happen in many such systems². In the current work we use a 2-sites viscoplastic selfconsistent model (2S-VPSC)^{3,4} to simulate texture development of two-phase Ag-Ni composites. In this model, there exist a strong interaction between two grains whose volumes are proportional to the volume fractions of both phases of the composite. Both interacting grains are embedded in a homogeneous equivalent medium having the average properties of the composite. The relative importance of both phenomena is evaluated by comparison of the results obtained via the 2-sites model and experimental textures of 50%Ag-50%Ni developed under free compression and rolling conditions. No crystallographic correlation but only volume and shape influences exist between both phases in this case.

Keywords: Texturas, materiales bifásicos, co-deformación.

Introducción

La textura de materiales bifásicos codeformables es difícil de entender debido a la alta inhomogeneidad de los campos de tensiones y deformaciones que se desarrollan. Además, el modo como ambas fases comparten la componente antisimétrica del gradiente de velocidad (spin) no es claro hasta ahora. Eso representa un problema adicional para la interpretación y simulación de texturas. A largo plazo, técnicas de FEM conjuntamente con códigos de simulación policristalina terminarán con resultados cuali-cuantitativos en acuerdo más o menos ajustado con los experimentos. Desafortunadamente la capacidad de cálculo de estos dos tipos de modelos combinados puede esconder algunas simples explicaciones sobre el comportamiento plástico en algunos casos modelo. Los compuestos Ag-Ni, así como otros materiales bifásicos FCC-FCC, ofrecen un modelo para el estudio de texturas debido a un buen número de razones. La Ag y el Ni

presentan inmiscibilidad completa para cualquier fracción de volumen, haciendo de ellos buenos candidatos para estudiar la influencia de la fracción de volumen en la textura. La tensión de fluencia del Ni depende fuertemente de pequeñas concentraciones de carbono pero puede ser mantenida muy parecida a la de la Ag. Los compuestos Ag-Ni muestran, consecuentemente, un muy buen alineamiento de granos a altas deformaciones, deformaciones proporcionales a la fracción de volumen de cada fase, spines internos muy bajos y una reorientación de ejes principales de deformación muy pequeña. Es posible aseverar que materiales bifásicos FCC-FCC codeformantes deberían ser los bifásicos más simples de estudiar en el tema de desarrollo de texturas. Por ejemplo el fenómeno de "curling" que aparece en bifásicos BCC-FCC parece estar completamente ausente. De todos modos, el comportamiento no es tan simple como podría esperarse. La velocidad de desarrollo de texturas en ambas fases, Ag y Ni, no es un fenómeno lineal y la influencia de la

fracción de volumen es difícil de entender aún manteniéndose cercano al 50%².

Si los modelos autoconsistentes (SC) van a ser usados en la simulación de desarrollo de texturas de materiales bifásicos, los mismos se deberían comportar mucho mejor en el tipo de materiales representados por los compuestos Ag-Ni. Los modelos SC de 1 sitio deberían ser capaces de tener en cuenta el modo como se comparten deformaciones, considerando cada grano como embebido en una matriz promedio cuyas propiedades son, en primera aproximación, proporcionales a la fracción de volumen de cada componente⁵.

El próximo paso en la modelización consiste en considerar una fuerte interacción con un primer vecino privilegiado. Esta aproximación es todavía aceptable en términos de tiempo de computación y debería mostrar algunas mejoras comparada con los modelos de 1 sitio. Un modelo 2S-VPSC ha sido recientemente desarrollado por Lebensohn y Canova⁴. Un resumen se da en la siguiente sección. Sin embargo el modo como ambas fases comparten el spin es todavía motivo de estudio. En esta publicación mostraremos resultados obtenidos siguiendo un criterio de repartición de spin que se describe en la sección 3.

Modelo autoconsistente de 2 sitios

Los métodos de homogeneización son usados generalizadamente para el cálculo de las propiedades mecánicas y el desarrollo de texturas de materiales. Estos modelos permiten la consideración de estados microscópicos heterogéneos para los granos constituyentes. El promedio de estos estados locales debería ser igual al estado homogéneo macroscópico aplicado al policristal. Aparte de los modelos usuales de Taylor y Sachs, por los cuales la deformación o la tensión se suponen homogéneos, respectivamente, muchos modelos SC han sido desarrollados en el pasado. La mayor parte de esos modelos SC han sido implementados numéricamente en su versión de 1 sitio⁵⁻⁸. Esas aproximaciones consideran cada grano como una inclusión embebida en un MEH que posee las propiedades promedio en cada grano constituyentes. Eso implica que los

efectos de vecindad son desechados. Se ha probado que esta suposición, en cierto modo gruesa, provee resultados aceptables en materiales monofásicos⁸. En materiales multifásicos los efectos de vecindad pueden ser relevantes cuando los sitios vecinos de fases diferentes están correlacionados morfológica y/o cristalográficamente. Para el modelo 2S-VPSC, el problema de Eshelby de 1 inclusión⁹ es extendido para tratar el caso de dos inclusiones elipsoidales interactuantes embebidas en una matriz viscoplástica que soporta un estado macroscópico determinado. Las ecuaciones fundamentales del modelo 2S-VPSC son resumidas aquí mientras que una descripción completa puede ser encontrada en Lebensohn y Canova⁴.

a) Relaciones constitutivas microscópicas:

$$\begin{aligned}\dot{\epsilon}_1 &= M_1^c : \sigma'_1 \\ \dot{\epsilon}_2 &= M_2^c : \sigma'_2\end{aligned}\quad (1)$$

donde $(\dot{\epsilon}_1, \sigma'_1)$ y $(\dot{\epsilon}_2, \sigma'_2)$ son los estados microscópicos en la inclusión 1 y 2 y las M^c 's son las compliancias microscópicas secantes.

b) Relaciones constitutivas macroscópicas:

$$\dot{E} = M : \Sigma' \quad (2)$$

donde (\dot{E}, Σ') es el estado macroscópico y M es la compliancia macroscópica secante.

c) Ecuaciones de interacción:

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon}_1 &= -\tilde{M}_{11} : \tilde{\sigma}'_1 - \tilde{M}_{12} : \tilde{\sigma}'_2 \\ \tilde{\epsilon}_2 &= -\tilde{M}_{21} : \tilde{\sigma}'_1 - \tilde{M}_{22} : \tilde{\sigma}'_2\end{aligned}\quad (3)$$

donde los estados “~” son los desvíos locales y las \tilde{M} 's son los tensores de interacción.

d) Ecuaciones de localización:

$$\begin{aligned}\sigma'_1 &= B_1^c : \Sigma' \\ \sigma'_2 &= B_2^c : \Sigma'\end{aligned}\quad (4)$$

donde los B^c 's son los tensores de localización.

e) Ecuación autoconsistente:

$$M = \langle M_{1,2}^c \cdot B_{1,2}^c \rangle \quad (5)$$

donde $\langle \rangle$ significa promedio pesado de los tensores locales.

Criterio de repartición de spin

En una aproximación de 2 sitios el modo en que los granos correlacionados comparten el spin depende al menos de los siguientes factores:

1. La estructura cristalina de ambas fases.
2. La forma de los granos vecinos.
3. La textura o, mejor dicho, el grado de desarrollo de la misma.
4. La resistencia de la interfase en el sentido de la tendencia a fragmentar y/o deformar inhomogéneamente en las vecindades de la interfase.
5. Correlación cristalográfica entre fases.
6. Fracción de volumen de ambas fases.
7. Razón entre las tensiones de fluencia de ambas fases.

Si, como consecuencia de una relación favorable entre algunos o todos esos factores, los granos tratan de mantener su orientación relativa constante los spines pueden ser calculados como el promedio pesado de ambos. En el caso opuesto, cuando los granos rotan independientemente uno del otro, los spines deberían ser calculados grano por grano siguiendo las reglas aceptadas para modelos de 1 sitio.

Si la geometría y distribución exacta de cada grano son conocidas podemos permitirle a cada grano, entre otros modos de deformación, deslizar a lo largo del borde de grano. En algunas situaciones especiales podemos suponer que no hay necesidad de que cada grano se reoriente independientemente si ambos granos pueden, complementariamente, encajar en el agujero originario. Muchas situaciones diferentes pueden ser imaginadas pero todas ellas requieren el conocimiento perfecto de las deformaciones y spines relativos de ambos granos.

Un modelo menos exigente puede ser obtenido escribiendo la ecuación de balance de spin para dos granos de igual volumen:

$$\begin{aligned} \Omega_{ij} &= \langle \Omega_{ij} \rangle = (\Omega_{ij}^{*1} + \Omega_{ij}^{*2} + \Omega_{ij}^{p1} + \Omega_{ij}^{p2}) / 2 = \\ &= \langle \Omega_{ij}^* \rangle + \langle \Omega_{ij}^p \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

donde Ω_{ij} es el spin macroscópico, Ω_{ij}^{*1} and Ω_{ij}^{*2} son los spines de la red y Ω_{ij}^{p1} and Ω_{ij}^{p2} son los spines plásticos de los granos 1 y 2 respectivamente. De acuerdo a esto, deberíamos usar un spin plástico promedio para ambos granos conjuntamente. La consecuencia directa es que ambos granos, en esta versión particular del método SC de 2 sitios, mantendrán constante su orientación relativa.

Esta regla no debería ser válida a lo largo de todo el proceso de deformación. Un trabajo mas detallado se lleva a cabo actualmente introduciendo algunas reglas empíricas que siguen aproximadamente el modelo de Condiciones Relajadas¹⁰. La razón para el éxito del presente modelo, según se muestra en la sección siguiente es, fundamentalmente, el comportamiento de ambas fases. Los compuestos Ag-Ni presentan baja inhomogeneidad debido al comportamiento microscópico similar de ambas fases.

Resultados y discusión

Los cálculos fueron efectuados bajo la suposición de que el spin es compartido proporcionalmente a la fracción de volumen. Para el caso de compresión libre una deformación equivalente de Von Mises (deVM) final de 1,3 ha sido simulada para poder comparar con resultados experimentales publicados previamente². También la textura para una deVM de 0,65 fue calculada. Se utilizaron 500 granos orientados aleatoriamente y aleatoriamente relacionados en pares con otros 500 granos de la otra fase. La dureza relativa de ambas fases fue parametrizada mediante una tensión de fluencia inicial para la fase dura (i.e. el níquel) de dos veces la tensión de fluencia de la fase blanda, tomada esta última arbitrariamente igual a 1. Deslizamiento $\{111\}\langle 110 \rangle$, usual en materiales FCC, fue supuesto para ambas fases. El endurecimiento por deformación se supuso lineal con pendientes de 1,5 para la Ag y 2 para el Ni, en las mismas unidades arbitrarias utilizadas para las tensiones críticas. Para la ecuación microscópica viscoplástica se supuso un exponente de 19 para ambas fases para la simulación de compresión simple. Las texturas

experimentales muestran a la Ag comportándose como un fluido viscoso que fluye alrededor de las partículas de Ni^{2,11}. Ese comportamiento sugiere usar diferentes exponentes para el caso de ensayos de laminación. Se asignó un exponente menor a la Ag (i.e. 5), induciendo un comportamiento más viscoso en ella, y un exponente mayor a la fase Ni (i.e. 33). Las texturas fueron procesadas y posteriormente analizadas usando el paquete de software popLA¹².

Para compresión simple, para deVM de 0,65 y 1,3, observamos que la intensidad de la textura evoluciona como se observa experimentalmente. La textura de la Ag evoluciona más rápidamente, siendo inicialmente más intensa que la textura del Ni. A mayores deformaciones la textura de la Ag se detiene en su evolución, excepto por alguna transferencia de intensidades entre componentes, mientras que el Ni continúa desarrollándose alcanzando intensidades mayores que la Ag a deVM de 1,3. Este efecto, que no es muy evidente en compresión simple, aparece claramente en la simulación y experimentos de laminación. La Fig. 1 a)-d) muestra figuras de polos (111) para Ag y Ni para deVM de 0,65 y 2,6. La textura de la Ag se ha detenido prácticamente a la mismas intensidades que presentaba a baja deformación. Mientras tanto el Ni, avanzando a diferente velocidad, alcanza intensidades mayores que la Ag a alta deformación. El efecto de diferentes velocidades de desarrollo puede ser asignado, en los primeros estadios de deformación, a la menor tensión de fluencia de la Ag. Pero, después de sólo algunos pasos de deformación, la Ag se endurece lo suficiente como para que el Ni comience a desarrollar textura casi a la misma velocidad. Por lo tanto, no se puede explicar mediante este modelo el desarrollo posterior de la textura de Ni y el casi detenimiento de la Ag. Este efecto puede ser explicado por un comportamiento cualitativamente diferente de la

Ag fluyendo libremente alrededor de las partículas de Ni. Desde el punto de vista de la mecánica del continuo este efecto ha sido explicado como consecuencia de un cambio rápido de orientación de los ejes principales de velocidad de deformación local (spreading effect) y de la superposición de diferentes velocidades de deformación locales (smoothing effect) en la fase más blanda². Ambas texturas simuladas se muestran muy similares a las experimentales, excepto porque presentan intensidades mayores. Este efecto es usual también entre simulaciones y texturas experimentales para materiales monofásicos, por lo que no debe sorprender aquí.

Agradecimiento: Este trabajo ha sido efectuado bajo proyecto del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)-Argentina. PID CONICET n° 3964/92.

Referencias

1. G. Wassermann, H.W. Bergmann and G. Frommeyer, Proc. 5th. Int. Conf. on Textures of Materials, Vol II, Springer, Berlin, 1978, p. 37.
2. R.E. Bolmaro, R.V. Browning, F.M. Guerra and A.D. Rollett, Mat. Sci. Eng. A175 (1994) 113.
3. G.R. Canova, H.-R. Wenk and A. Molinari, Acta metall., 40 (1992) 1519.
4. R.A. Lebensohn and G.R. Canova, Acta mater., to be published.
5. A. Molinari, G. Canova and S. Ahzi, Acta metall., 35 (1987) 2983.
6. E. Kroner, Acta metall., 9 (1961) 155.
7. J.W. Hutchinson, Proc. Roy. Soc London, A348 (1976) 101.
8. R.A. Lebensohn and C.N. Tomé, Acta metall., 41 (1993) 2611.
9. J.D. Eshelby, Proc. Roy. Soc. London, A241 (1957) 376.
10. R.E. Bolmaro, A. Fourty and R. Lebensohn, to be published.
11. J.J. Petrovic and A.K. Vasudevan, Mat. Sci. Eng., 34 (1978) 39.
12. Kallend, U.F. Kocks, A.D. Rollett and H.-R. Wenk, Mat. Sci. Eng. A, 132 (1991) 1-11.

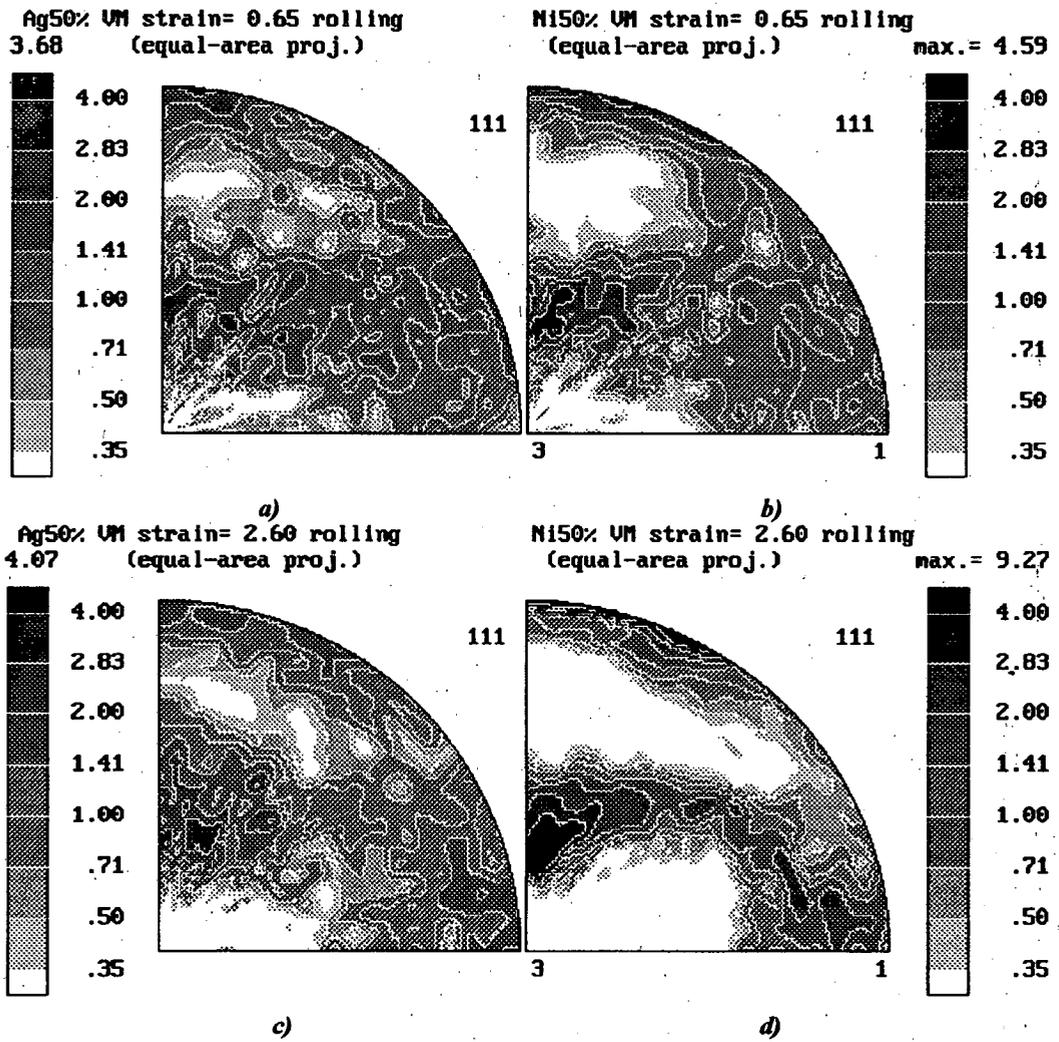


Fig. 1. Simulación de textura de laminado para compuestos 50%Ag-50%Ni. a)-b) Figuras de polos (111) para Ag y Ni a una deformación equivalente de Von Mises de 0,65. c)-d) Idem a una deformación equivalente de Von Mises de 2.6