

# ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE LA ORIENTACION RELATIVA EN LA FRAGMENTACION DE GRANOS. SIMULACION DE FENOMENOS DE RECRISTALIZACION

A. Fourty, M.A. Bertinetti, J.W. Signorelli y R.E. Bolmaro

Instituto de Física Rosario - Fac. de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET-UNR. Bv. 27 de febrero 210 bis. 2000. Rosario, Argentina.

E-mail: [bolmaro@ifir.edu.ar](mailto:bolmaro@ifir.edu.ar) - Web: <http://www.ifir.edu.ar/~materiaii>

Se presentan simulaciones llevadas a cabo en probetas símil Cu laminadas hasta una deformación de Von Mises igual a 2, utilizando un Modelo Viscoplastico Auto-Consistente (VPSC). El mismo tiene incorporado un esquema de corrotación entre granos vecinos. En un trabajo previo<sup>(4)</sup> se mostró que la fragmentación de los granos y consecuente generación de Bordos de Dislocaciones Geométricamente Necesarias (GNDB) se puede simular de un modo aproximado mediante este esquema de corrotación. Se calcula la orientación relativa entre las partes de cada grano generadas de este modo, y se analiza la relación que existe entre ésta y la deformación de Von Mises y la tensión de corte resuelta crítica para cada componente. Debido a la influencia que la orientación relativa entre granos o partes de granos y la deformación ejercen sobre la recristalización, se lleva adelante un análisis sobre la factibilidad de incluir estas variables para evaluar la probabilidad de crecimiento de granos. Se calcula, además, el porcentaje de componentes ideales de texturas en probetas laminadas, y se realiza un análisis estadístico de los parámetros mencionados en términos de dichas componentes.

We present simulations performed in simile copper rolled samples at Von Mises strain of 2, using a Visco Plastic Self Consistent model (VPSC). We have incorporated a co-rotation scheme among closest grains of the polycrystal. In a previous work<sup>(4)</sup> we have shown that grain fragmentation and consequent generation of Geometrically Necessary Dislocation Boundaries (GNDB) can be approximately simulated by that co-rotation scheme. We calculate the relative orientation between grain fragments generated in such way and we correlate it with the Von Mises strains and Critical Resolved Shear Stress (CRSS) calculated for each component. Due to the influence over recrystallization phenomena of the relative orientation between grains, or grain fragments, and the deformation we have performed an extensive analysis about the possibility of including those variables to calculate grain growth probability. We also calculate the percentage of ideal texture components in rolled samples and we statistically correlate the variation of strains, misorientation and CRSS.

## Introducción

Se ha observado experimentalmente que cuando algunos metales y aleaciones se someten a gran deformación plástica se produce fragmentación de los granos. Son pocos los autores que han formulado aproximaciones teóricas de este hecho.

En general la microestructura desarrollada durante la deformación de policristales presenta como característica principal arreglos de dislocaciones. Estos arreglos pueden dividirse en Bordos de Dislocaciones Incidentales (IDB) y Bordos Geométricamente Necesarios (GNB)<sup>(1-3)</sup>. Los IDB presentan ángulos de misorientación\* (orientación relativa) menores que los producidos por los GNB. Los IDB se generan por dislocaciones acumuladas estadísticamente sobre toda la probeta, formando celdas equiaxiadas. Los mismos no serán estudiados en el presente trabajo. Los GNB se producen por fragmentación de los granos y se observan en la mayor parte de las aleaciones y en materiales sometidos a diversos caminos de deformación. Existen resultados experimentales que muestran que los GNB tiene una función de distribución característica. Fourty et. al.<sup>(4)</sup> mostraron que puede lograrse un buen ajuste con los

resultados experimentales con hipótesis simples acerca de la rotación de los granos en un modelo computacional de desarrollo de textura. En este trabajo se intenta abordar mediante el mismo método la simulación del problema de la fragmentación de los granos utilizando un modelo Visco Plástico Autoconsistente (VPSC)<sup>(5,6)</sup>. El código tiene incorporado un esquema de corrotación entre granos vecinos de manera empírica. Se muestra el desarrollo del modelo y una posible aplicación al problema del desarrollo de texturas de recristalización. El presente es un trabajo preliminar sobre la estadística de las misorientaciones generadas por los GNB y su relación con las componentes de textura.

Las tres magnitudes que juegan un papel importante en la recristalización son: la energía generada durante la deformación y almacenada por los granos, el ángulo de misorientación del borde de grano (como una simplificación de la estructura del borde del grano)<sup>(7)</sup> y el tamaño del grano. En la recristalización el material busca alcanzar un estado de energía mínima. Esto lo logra mediante dos mecanismos: nucleación y crecimiento de grano. Los granos con una gran energía almacenada (altamente deformados) están en condiciones de nuclear y quedar libres de dislocaciones por recristalización. Otra posibilidad es que estos granos sean invadidos por vecinos que tengan una energía almacenada menor. Algunos autores afirman que, dependiendo de la respectiva importancia de los procesos de nucleación y de migración de los bordes de grano, las texturas de

\* Si bien la palabra misorientación no existe en nuestro idioma, nos parece adecuado utilizarla aquí como traducción de "misorientation", que indica orientación relativa entre los granos.

recristalización tienden a favorecer las componentes de alta o de baja deformación (Wenk<sup>(8)</sup>).

El ángulo de misorientación en el borde de grano influye en su movilidad de modo complicado; la misma crece constantemente desde aproximadamente 5° hasta 20° donde, en mayor o menor medida, estabilizarse allí.

### Simulaciones

Las simulaciones se realizaron sobre un material similar Cu, adoptando los sistemas de deslizamiento  $\{111\}\langle 110 \rangle$  típicos de los materiales fcc. Se considera una ley de endurecimiento de Voce, considerando una relación entre el endurecimiento latente y el autoendurecimiento de los sistemas de deslizamientos igual a 1.4. La ley constitutiva utilizada es la viscoplástica cuyo exponente (inversa a la sensibilidad de la velocidad de deformación) se toma  $n=100$ . El coeficiente de interacción utilizado es  $n^{\text{efectivo}} = 2$ <sup>(9)</sup>. La fragmentación de los granos se incorpora permitiendo a cada grano compartir la rotación con otros dos considerados sus vecinos, generándose así una misorientación entre dos partes del grano. Se consideran en la simulación 5000 pares de granos. El ensayo simulado es laminado hasta una deformación equivalente de Von Mises igual a 2. La textura resultante se analiza en términos de las componentes ideales de textura de laminado (Cube, Goss, Brass, Copper, etc). Se agrupan los granos según su cercanía a cada una de dichas orientaciones y en cada conjunto se calculan y analizan los promedios de deformación de Von Mises local, tensión de corte resuelta crítica (CRSS) y misorientación. También se analizan los promedios por componentes de las misorientaciones, consecuencia de las dislocaciones almacenadas como GNB y calculadas directamente con el esquema de corrotación.

Las texturas de recristalización acentúan usualmente la componente cúbica en los metales fcc. El resultado más llamativo para la recristalización del cobre es el aumento de esta componente luego del proceso de laminado y recristalización. Las simulaciones llevadas a cabo mediante la implementación del modelo VPSC con un esquema de corrotación incorporado, muestran resultados prometedores en las estimaciones de magnitudes fundamentales en la recristalización.

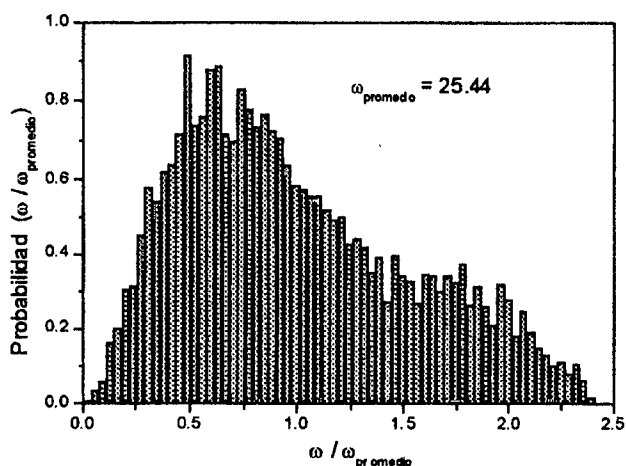


Fig. 1: Función de distribución normalizada de los ángulos de misorientación producidos por los GNB para una deformación equivalente de Von Mises de 2.0.

### Resultados y Discusión

La figura 1 muestra la función de distribución de los ángulos de misorientación, normalizada respecto a la misorientación promedio para una deformación equivalente de Von Mises igual a 2.00. La distribución tiene la forma de una función lognormal con una pequeña protuberancia a ángulos mayores debido al desarrollo de componentes aleatorias a grandes deformaciones. La presencia de esta componente aleatoria se debe probablemente a una sobrestimación de la misorientación debido a la simplicidad del modelo. Este resultado acuerda con los experimentos<sup>(1-3)</sup> y fue discutido en un trabajo previo<sup>(10)</sup>.

Las componentes ideales de laminado empleadas para el análisis de las texturas se muestran en la Tabla I. Se consideraron cercanas a cada una de dichas orientaciones todos aquellos cristales cuya misorientación con las componentes ideales fuera menor a 15°.

Componente	$\{hkl\} \langle uvw \rangle$
Goss	$\{011\} \langle 100 \rangle$
Brass	$\{011\} \langle 211 \rangle$
S	$\{123\} \langle 634 \rangle$
Cube	$\{001\} \langle 100 \rangle$
H	$\{001\} \langle 110 \rangle$
Cube-Goss (CG)	$\{021\} \langle 100 \rangle$
Cube-H (CH)	$\{001\} \langle 120 \rangle$
Taylor	$\{4\ 4\ 11\} \langle 11\ 11\ 8 \rangle$
Copper	$\{112\} \langle 111 \rangle$
Otras (Other)	

Tabla I. Componentes de textura en materiales FCC laminados.

En la figura 2a) se muestra la misorientación media entre pares de granos clasificadas por componente. Las componentes han sido ordenadas en la dirección de fracción de volumen creciente. Puede observarse en la gráfica que el ángulo de misorientación entre ambas partes del grano fragmentado correspondiente a la componente Cube es el más alto.

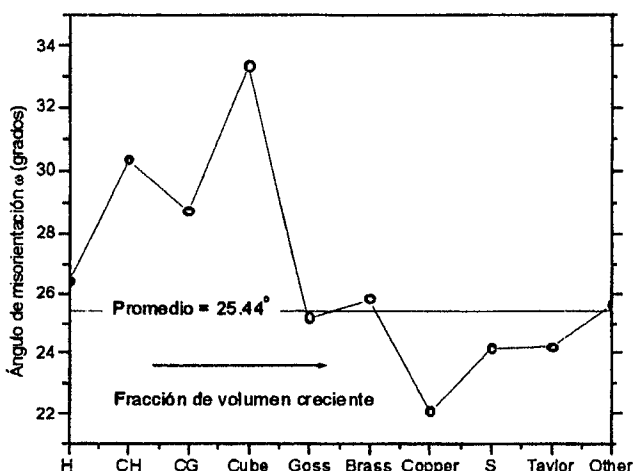


Figura 2a: Ángulo promedio de misorientación entre granos para todas las componentes ideales de textura de laminado.

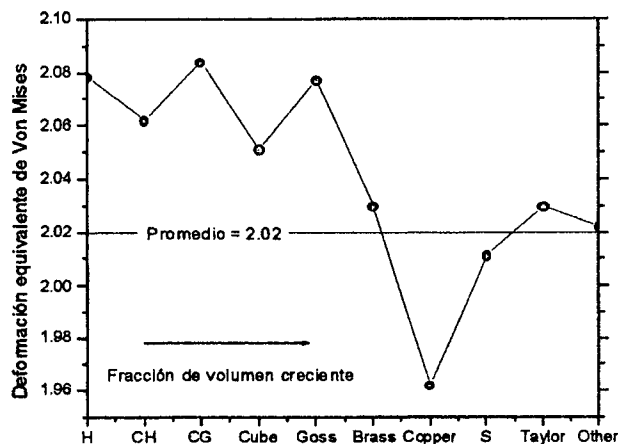


Figura 2b: Deformación local de Von Mises promedio para todas las componentes ideales de textura de laminado.

En las figuras 2b) y 2c) se muestran distintas formas de estimar la energía de deformación, promediadas para grupos de cristales pertenecientes a las diferentes componentes y ordenadas también en función de la fracción de volumen. Una de las maneras de estimar la energía de deformación es calculando la deformación equivalente de Von Mises de cada grano (2b). La energía de deformación está relacionada con la densidad de dislocaciones  $\rho$  mediante:  $E = \rho(\mu b^2) / 2$ , donde  $\mu$  y  $b$  son el módulo de corte y el vector de Burgers, respectivamente. La densidad  $\rho$  es a su vez proporcional a la deformación acumulada. Otra modo es suponer que el endurecimiento de los sistemas de deslizamiento de cada grano provee una energía de deformación adicional incremental luego de cada paso de deformación. Como la componente del trabajo de endurecimiento debida a la tensión de fluencia es proporcional a  $\sqrt{\rho}$ , la energía puede estimarse como:  $E_{\text{grano}} \propto (\tau_{\text{grano}}^f - \tau_0)^2$ . Ese cálculo se muestra en la Fig. 2c).

La deformación local equivalente de Von Mises, que se muestra en la figura 2b), no presenta un pico marcado. En cambio puede notarse que para varias componentes (incluida la Cube) la deformación es alta y para otras es menor, con un marcado decrecimiento en la componente

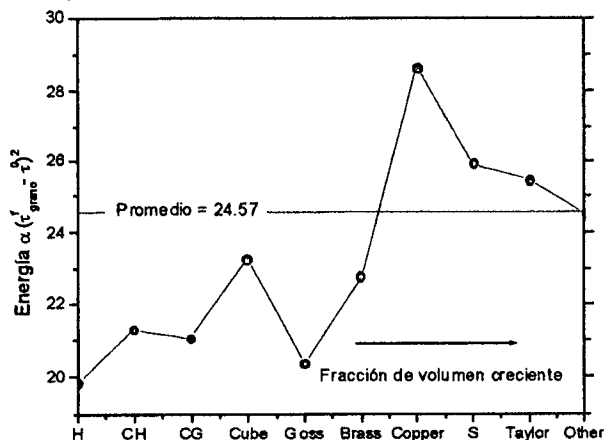


Figura 2c: Energía proporcional al cuadrado de la diferencia de tensiones críticas resueltas entre el paso final de deformación y el inicial, para cada grano, agrupados por componentes ideales de textura de laminado.

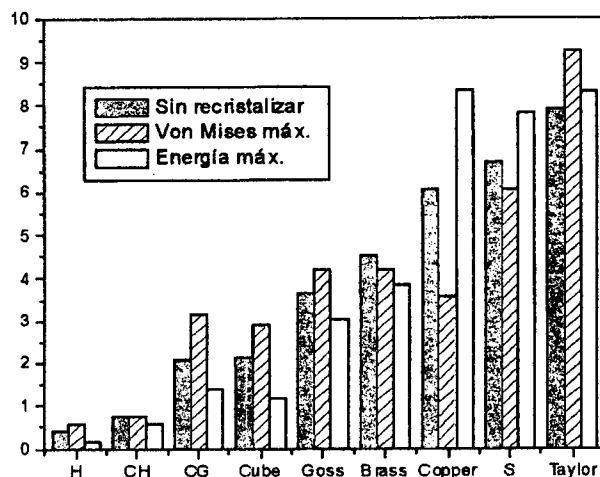


Figura 3: Porcentaje de componentes ideales de textura de laminado para las texturas de deformación simuladas, y con recrystallización posterior según ambos criterios.

Copper. Los valores relacionados con el endurecimiento (2c) muestran, por el contrario un pico para la componente Copper y otro, de menor importancia, para la componente Cube. Es importante señalar que las componentes están ordenadas en las gráficas de manera que la fracción de volumen de las mismas crece hacia la derecha. Las componentes H y CH se presentan con una fracción de volumen menor al 1%, lo cual lleva a despreciar la contribución de las mismas.

Los resultados de la simulación de las misorientaciones acuerdan parcialmente con un trabajo publicado recientemente por Zaefferer et al.<sup>[11]</sup>. Ellos encuentran mediante caracterización por diagramas de Kikuchi obtenidos por TEM, que la componente cúbica presenta bordes de grano de alto ángulo y que las misorientaciones de los GNB son usualmente mayores para las componentes cúbicas que para las demás. También Delannay et al.<sup>[12]</sup> mostraron resultados similares respecto de la alta misorientación presentada por la componente cúbica.

En la figura 3 se muestran las texturas simuladas como porcentajes de las componentes ideales de textura de laminado para un material sin recrystallizar y un material recrystallizado. Para la recrystallización se adoptaron dos criterios diferentes. Por el primero se calcula el valor de la deformación equivalente de Von Mises de cada una de las partes del grano, permitiendo que nucleee la de mayor deformación. En el segundo el parámetro que comanda el comienzo de la nucleación es el incremento de la tensión de fluencia. A mayor tensión de fluencia corresponde mayor probabilidad de nucleación. En ambos se calcula la misorientación entre las partes fragmentadas de cada grano. Si ésta es mayor que  $15^\circ$  su movilidad se supone lo suficientemente alta para que los granos que comienzan a nuclear crezcan a expensas de los primeros vecinos que no lo han hecho. En ninguno de los dos criterios se ha tenido en cuenta el tamaño de los granos.

La textura de recrystallización obtenida con el criterio de Von Mises máxima, presenta un esperado aumento de la componente Cube y un decremento de la componente Copper. También aumentan las componentes CG y Goss usualmente mencionadas como dominantes en algunos

procesos de recristalización. Este resultado sugiere que el primer paso en el proceso de crecimiento de granos, cuando los granos poseen todos casi el mismo tamaño, está comandado por la movilidad del borde de grano y por su deformación más que por el tamaño de los mismos. La tensión de fluencia no parece ser un parámetro adecuado para medir la energía almacenada probablemente debido a la combinación de dos factores. Uno de ellos es una limitación propia del modelo VPSC. Estos modelos han sido diseñados para calcular con cierta exactitud las deformaciones de los granos y no las tensiones. Las mismas pueden en general estar subestimadas y es claro que los granos que más deformen presenten menor tensión de fluencia. La carencia de interacción elástica inhabilita por otro lado un cálculo correcto de las tensiones acumuladas que serían una medida de las energías provistas por los arreglos de dislocaciones producidos.

Además los arreglos de dislocaciones que producen acumulaciones de energía elástica lo hacen en forma muy localizada y un simple promedio sobre todo el grano del efecto sobre el  $\tau$  de fluencia no puede dar cuenta de las energías puestas en juego en el proceso de recristalización. Estas provienen de interacciones de corto alcance (hipótesis de LEDS [13]) y son probablemente mejor simuladas como proporcionales a la deformación total sufrida por cada grano.

### Conclusiones

El fenómeno de la recristalización puede entenderse como una concatenación de:

- a) Nucleación: Se produce cuando la energía proporcional a la deformación local almacenada es mayor que la almacenada por los granos vecinos.
- b) Crecimiento: Se produce cuando la movilidad del borde de grano alcanza cierto valor umbral, proporcional al ángulo de misorientación, como lo indican las mediciones experimentales. Una vez agotado el volumen próximo con alta misorientación (producto de la deformación) la probabilidad de que los granos vecinos más lejanos presenten un ángulo de misorientación grande es alta.
- c) Crecimiento posterior: El tamaño de grano toma el control y es el responsable del crecimiento ulterior de los granos por competencia de energías de volumen-superficie.

Estos resultados son muy prometedores para la modelización del desarrollo de texturas de recristalización en cobre y otros materiales FCC. La componente Cube presenta el mayor ángulo de misorientación y un alto valor de deformación equivalente de Von Mises. El próximo paso para mejorar los cálculos sería la introducción de la fragmentación como una serie de varios pasos consecutivos, y la introducción de estos resultados en modelos autoconsistentes para la simulación de texturas de recristalización.

La conclusión principal de este trabajo es que, en el proceso de deformación, el modelo es capaz de reproducir no sólo la distribución estadística de ángulos de misorientación sino también algunos aspectos más finos de la distribución. Que los cristales co-deformantes

compartan no sólo la deformación sino la rotación y que la fragmentación de éstos pueda ser simulada con un modelo tan simple induce a pensar en una fuerte influencia de la "geometría" del ensayo y la topología de la distribución cristalina. Esto no significa que se atribuyen propiedades sólo geométricas tanto a las texturas como al proceso de recristalización, sino que estos mecanismos son dominantes.

### Referencias

- [1] D.A. Hughes and N. Hansen. *Acta mater* **45** (1997) 3871.
- [2] Q. Liu, D. Juul Jensen, and N. Hansen. *Acta mater* **46** (1998) 5819.
- [3] N. Hansen and D. Juul Jensen. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **357** (1999) 1447.
- [4] A. Fourty, M.A. Bertinetti, J.W. Signorelli, R.E. Bolmaro y H.-G. Brokmeier. *Anales AFA* 2000
- [5] R.A. Lebensohn and G.R. Canova. *Acta mater.*, **44** (1997) 3687.
- [6] A. Molinari, G.R. Canova and S. Ahzi. *Acta metall.*, **35** (1987) 2983
- [7] F.J. Humphreys and M. Hatherly. *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. 1996. Pergamon. U.K.
- [8] H.-R. Wenk, G. Canova, Y. Bréchet and L. Fladin. *Acta mater.*, **45** (1997) 3283-3296.
- [9] R.E. Bolmaro, H.-G. Brokmeier, J.W. Signorelli, A. Fourty and M.A. Bertinetti. *Current conference. SIZE-STRAIN III*. Trento.
- [10] R.E. Bolmaro, A. Fourty, A. Roatta, M.A. Bertinetti and J. Signorelli. *Scripta mater.* **43** (2000) 553-559.
- [11] S. Zaefferer, T. Baudin and R. Penelle. *Acta mater.* **49** (2001) 1105-1122.
- [12] L. Delannay, O.V. Mishin, D. Juul Jensen and P. Van Houtte. *Acta mater.* **49** (2001) 2441-2451.
- [13] D. Kuhlmann-Wilsdorf, *Acta mater.* **47** (1999) 1697-1712.

**Agradecimientos:** Este proyecto fue parcialmente financiado por PIP 4825. CONICET-Argentina.