

# ACERCA DE LOS BORDES DE GRANOS COMO FUENTES DE DISLOCACIONES Y SU INFLUENCIA EN EL DESARROLLO DE TEXTURAS A GRANDES DEFORMACIONES.

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

Instituto de Física Rosario - Fac. de Cs.Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET- UNR. Rosario, Argentina.  
*bolmaro@ifir.edu.ar*

La propuesta teórica y descubrimiento experimental de la existencia de las fuentes de Frank y Read como modo de multiplicación de dislocaciones jugó un papel muy importante en la metalurgia física y la ciencia de los materiales. Ese mecanismo consiste en un segmento de dislocación cuyos extremos están anclados en precipitados, nodos o sitios donde la dislocación abandona el plano de deslizamiento. Dado que las mejores evidencias experimentales de la existencia de ese mecanismo, en policristales, fueron encontradas lejos de los bordes de granos se infirió que es en el interior de los mismos donde estas fuentes son activas. A pesar de que se ha recolectado mucha evidencia de la existencia de fuentes de dislocaciones en los mismos bordes de granos, la imposibilidad de efectuar microscopía detallada a grandes deformaciones en esas regiones ha dificultado una discusión más exhaustiva del tema. En el presente trabajo se presentan argumentos y evidencia indirecta apoyando la tesis de que la generación de dislocaciones ocurre fundamentalmente en los bordes de granos. El fraccionamiento y consecuente creación de bordes de granos de gran ángulo en el interior de los cristales pueden ser explicados sólo por la existencia de zonas de alta concentración de tensiones y consecuente generación de dislocaciones en el borde de granos.

The theoretical and experimental discovery of Frank-Read dislocation sources played a fundamental role in metallurgy and materials science. It can basically be described as a dislocation segment pinned between two precipitates, defects or nodes where the dislocation abandons the slip plane. The best experimental evidences for the activity of that mechanism, in polycrystals, were found far away from grain boundaries. The natural conclusion would be that dislocation sources are Frank-Read sources active in the interior of the crystals. However large evidence has been collected regarding dislocation sources right in the grain boundaries. Experimental difficulty in actually observing, by electron microscopy, grain boundary dislocations at large deformations has precluded advances in the field. In the current paper we present some arguments and indirect evidence supporting the thesis of dislocation generation mainly on the grain boundaries. Fragmentation and consequent high angle dislocation boundaries in the interior of the grains can be explained only if we assume the existence of high concentration of stresses in the grain boundaries. The dislocation sources, whichever the nature, would be mainly active on those regions.

## 1.- Introducción

Con la aparición de las publicaciones fundamentales de E. Orowan [1], M. Polanyi [2] y G.I. Taylor [3] las dislocaciones irrumpieron en la escena para resolver el problema de la

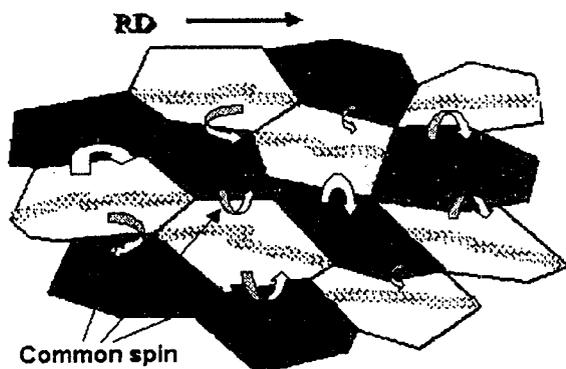


Fig. 1. Esquema de co-rotación de cristales y fragmentación.

relativamente baja tensión de fluencia presentada

por los materiales plásticos cristalinos. Posteriormente sólo hacía falta incorporar una fuente continua de dislocaciones capaz de proveer una cantidad inagotable de tales defectos para que la deformación pudiese proseguir más o menos ininterrumpidamente. El primer mecanismo propuesto fue el de F.C. Frank y W.T. Read [4-5] y las primeras confirmaciones experimentales fueron provistas por Dash [6], Ruff and Wilsdorf [7], Milevskii and Chuvilin [8] y otros. Un modo posible de obtener un segmento de Frank-Read es deslizamiento cruzado parcial de una dislocación de tornillo.

El modo como las dislocaciones se generan, interactúan y se traban mutuamente es de fundamental importancia por al menos dos razones: a) El proceso de "strain hardening", o endurecimiento por trabajado mecánico, depende fundamentalmente de esos procesos. b) El desarrollo de texturas u orientaciones cristalinas preferenciales dependen del tipo y cantidad de sistemas de deslizamiento generados y, según se

ha puesto de manifiesto recientemente, del modo como los cristales fragmentan debido a acumulación de dislocaciones [9-11].

Los diferentes arreglos de dislocaciones han sido clasificados como: a) dislocaciones estadísticas (ID: Incidental Dislocations, SS: Statistically Stored) aquellas que son generadas en forma aleatoria y que producen acumulaciones dispuestas en arreglos más o menos homogéneamente distribuidos y simetría equiaxiada. b) dislocaciones geoméricamente necesarias (GND: Geometrically Necessary Dislocations) las que se generan para satisfacer incompatibilidades entre cristales, entre fases o macroscópicas (típico caso de la flexión de una barra). Un cristal particular de un arreglo policristalino carece de toda información acerca de la forma final macroscópica de la pieza sometida a deformación, excepción hecha de la forma que a su vez el test le impone a los bordes de grano. Las llamadas GND generan arreglos de dislocaciones que poseen una disposición geométrica (forma y orientación respecto de los ejes de la probeta) bastante independiente de la

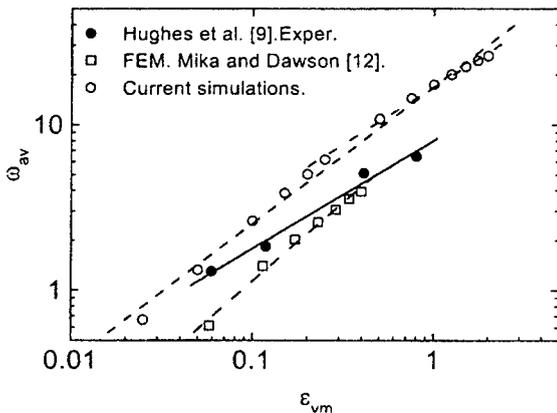


Fig. 2. Leyes de potencia entre la orientación relativa promedio y la deformación equivalente. Experimental Hughes et al. [9], Coef. regresión lineal: 0.656. FEM Mika and Dawson [12]. Coef. regresión lineal: 0.95. Simulaciones: Coef. regresión lineal a pequeñas deformaciones: 0.83; idem a grandes deformaciones: 0.69

orientación del cristal pero que copia aproximadamente la geometría de la deformación macroscópica. Por otro lado las llamadas ID generan las estructuras denominadas Cell Boundaries (CB) o Incidental Dislocation Boundaries (IDB) que se mantienen aproximadamente equiaxiadas. Parece claro que las GND deberían obtener información sobre la forma y orientación de los bordes de grano por su mecanismo de origen: al ser dislocaciones

generadas principalmente en los bordes de grano, y atrapadas en algún lugar a distancias intermedias entre los mismos, acarrean por naturaleza la información que evidencian en la geometría de sus arreglos. Por el contrario, las ID estarían generadas en el interior de los granos, probablemente en fuentes de Frank-Read u otros defectos, y por lo tanto despojadas de toda información sobre la geometría macroscópica. De allí su forma equiaxiada y su independencia del tipo de test y grado de deformación.

## 2. Modelo

En simulaciones de desarrollo de texturas a deformaciones intermedias y altas, llevadas a cabo mediante métodos autoconsistentes, se ha introducido el concepto de co-rotación de granos. Mediante el mismo los cristales sometidos a la deformación simulada son apareados de modo de compartir el spin que le corresponde en partes iguales y manteniendo su orientación relativa constante (en inglés: "misorientation"). La Fig. 1 muestra esquemáticamente la co-rotación entre granos y la consecuente fragmentación producida con las reglas del modelo. La Fig. 2 muestra el crecimiento del ángulo de orientación relativa promedio calculado en comparación con resultados experimentales obtenidos por medio de microscopía electrónica de transmisión [9,11,12]. Las simulaciones han sido exitosas no sólo en la

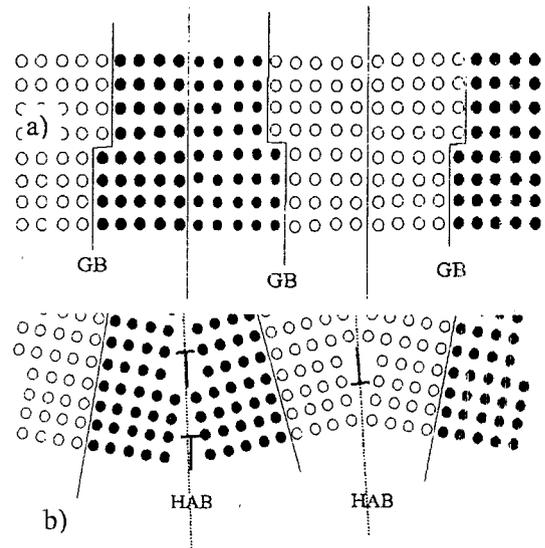


Fig. 3. a) "Escalones" en los bordes de grano coherentes. b) Acumulación de dislocaciones de borde en las zonas centrales de los granos por deslizamiento de los "escalones".

determinación de las componentes de texturas y sus intensidades relativas sino también en la predicción de propiedades altamente locales

(como deformaciones y tensiones residuales) y parámetros microscópicos de correlación (orientación relativa en bordes de grano de gran ángulo por acumulación de GND) [13-14]. Cualquier mecanismo de deformación basado en fuentes del tipo Frank-Read alojadas en las zonas internas a un grano no debería generar ninguna

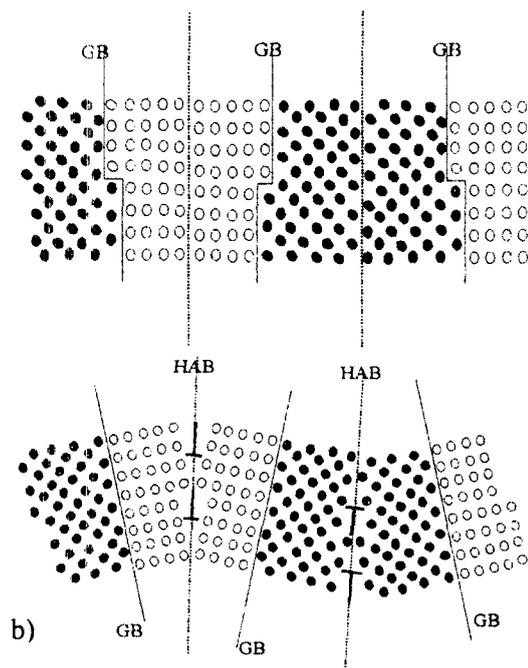


Fig. 4. a) "Escalones" en los bordes de grano incoherentes. b) Acumulación de dislocaciones de borde en las zonas centrales de los granos por deslizamiento de los "escalones".

fragmentación en las zonas medias del grano (Fig. 1). Además la acumulación de dislocaciones en los bordes de grano (pile ups) ha sido abandonada como mecanismo de endurecimiento [12]. Algunos modelos de dislocaciones en bordes de grano y los llamados "escalones" o "arrecifes" (steps o ledges) dan cuenta de la habilidad de estas regiones para generar y mantener una provisión continua de defectos lineales [13]. La Fig. 3 a) muestra una colección de granos formando una interfase coherente con defectos en cada borde de grano usualmente caracterizados como "escalones" (steps). Las líneas punteadas marcan las ubicaciones de las zonas medias de cada cristal. La Fig. 3 b) muestra la generación de dos dislocaciones de borde en la zona central de cada cristal, producto del desplazamiento de los escalones. Estas dislocaciones provocan la aparición de HAB por acumulación de GND. Los bordes de grano originales mantienen su identidad en el caso de tratarse de dos materiales diferentes,

como en un material bifásico, o por pequeñas orientaciones relativas preexistentes entre ambos cristales. La Fig 4 a)-b) muestra el mismo mecanismo actuando en el borde de grano de una interface incoherente por tratarse de granos orientados muy diferentemente. La incoherencia de ambas fases puede ser alternativamente subsanada por la introducción de dislocaciones virtuales parciales [13]. Las mismas no son indicadas en la figura porque resultan irrelevantes al razonamiento. Modelos tempranos de borde de granos asumen una distribución cuasi-continua de dislocaciones. No obstante, suponer una relajación de las tensiones locales en el borde de grano mediante dislocaciones es suponer un arreglo particular de los átomos que no se encuentra definitivamente demostrado [14]. La tendencia en un material policristalino a forzar direcciones de corte independientemente de la orientación de los cristales se manifiesta en el conocido fenómeno de la aparición de bandas de dislocaciones en direcciones a  $35^\circ$  - $45^\circ$  de la dirección de sollicitación macroscópica. Principalmente en materiales donde los sistemas de deslizamiento accesibles son abundantes, como en los FCC, es de esperar una transferencia del plano macroscópico de deslizamiento de grano a grano mediante un mecanismo como el descrito. Los cambios de orientaciones se acumularían principalmente en las zonas centrales de cada grano por crecimiento de HAB. Posteriormente, a medida que ese ángulo crece, las nuevas zonas de HAB se transforman en nuevas emisoras de dislocaciones y dan lugar a nuevos procesos de fragmentación. Se ha demostrado que, debido al corto alcance de las tensiones desarrolladas, los arreglos de dislocaciones en los HAB son estructuras de dislocaciones de baja energía (LEDS). Por lo tanto, el desarrollo de texturas mediante la creación de orientaciones relativas donde no las hay podría ser energéticamente favorable, en lugar de utilizar el mecanismo de reducir las orientaciones relativas preexistentes en los bordes de grano. Esa aparente contradicción puede entenderse como el desarrollo de un orden orientacional de largo alcance (textura) a costa de la creación de un desorden de corto alcance. En suma, mediante el modelo de co-rotación se le permite a los granos hacer lo que debería ser bastante obvio: los cristales individuales no pueden rotar, al menos en el sentido de despegarse, rotar y pegarse de nuevo a sus vecinos. Son capaces de rotar por acumulación de dislocaciones en el interior de los granos. En tal sentido se trata sólo de un modo diferente de lograr rotar por acumulación de dislocaciones. En

el modelo de granos libremente rotando las dislocaciones creadas en el interior de los granos pueden ser generadas solamente de pares que se moverían a través de todo el cristal hasta los bordes de grano, donde aparecerían como escalones. El modelo de co-rotación no es sólo un modo de suavizar la intensidad de las texturas sino que representa un modo simple de reflejar una situación física real. Las dislocaciones son realmente almacenadas en los GNB en el interior de los granos, como ha sido experimentalmente observado por varios autores.

### 3. Conclusiones

Como primera aproximación resulta plausible, y hasta atractivo, utilizar la aproximación de bordes de grano con orientación relativa invariante y adjudicar toda la capacidad de desarrollo de texturas a GNB o HAB ubicados en las zonas centrales de los cristales. Una discusión que estuvo presente varios años atrás reaparece actualmente por el interés que despierta la influencia del mecanismo de acumulación de dislocaciones en los HAB con relación al desarrollo de texturas [15,16]. A muy grandes deformaciones es esperable un cambio de mecanismo debido a las limitaciones impuestas por la discretitud de la red. Un mecanismo de deformación basado en lo que se denomina "dislocation shuttling" entre bordes de grano opuestos puede explicar la limpieza encontrada en la estructura de los granos. Este mecanismo es incompatible con el esquema de co-rotación utilizado en las simulaciones y fundamentado en el presente modelo. Resulta claro por otro lado que el modelo supone una exigencia excesiva por al menos tres razones. En primer lugar los bordes de grano seguramente pueden acomodar rotaciones relativas y contribuir parcialmente al desarrollo de texturas. En segundo lugar las fragmentaciones de los granos no son únicas sino que el número de los HAB crece con la deformación por lo que el valor promedio de las orientaciones relativas desarrolladas tiende a mantenerse más bajo que los valores calculados (Fig. 2). Por último, los IDB también contribuyen al desarrollo de texturas aún cuando ello sea sólo mediante la creación de componentes de textura aleatorias o "background" debido a su naturaleza estadística. No obstante, el modelo de co-rotación representa una aproximación quizás mejor que la suposición de cristales independientes. Modelos más avanzados, como los modelos basados en técnicas FEM y los llamados autoconsistentes de n-sitios, carecen por otro lado de la información necesaria acerca de la discretitud de la red

cristalina y las complejas interacciones entre dislocaciones. Es de esperar que los mismos tiendan por lo tanto a suavizar el fenómeno de fragmentación y distribuirlo en todo el volumen de cada cristal y a sub-valorar el valor de las orientaciones relativas creadas en los HAB.

### Referencias

- 1.- E. Orowan, Zeits. f. Physik, **89** (1934) 634.
- 2.- M. Polanyi, Zeits. f. Physik, **89** (1934) 660.
- 3.- G.I. Taylor, Proc. Roy. Soc., **145** (1934) 362.
- 4.- F.C. Frank and W.T. Read, Symposium on Plastic Deformation of Crystalline Solids (Carnegie Inst. of Tech. and Of. of Naval Res., Pittsburgh, 1950) p. 44.
- 5.- F.C. Frank and W.T. Read. Phys. Rev., **79** (1950) 722-3.
- 6.- W.C. Dash, J. Appl. Phys. **27** (1956) 1193-5.
- 7.- A.W. Ruff Jr. and H.G.F. Wilsdorf, Acta met. **13** (1965) 694-5.
- 8.- L.S. Milevskii and Yu.N. Chuvilin, Sov. Phys. Solid State, **20** (11) (1978) 1883-6.
- 9.- D.A. Hughes, Q. Liu, D.C. Chrzan and N. Hansen, Acta mater., **45** (1997) 105.
- 10.- D. Kuhlmann-Wilsdorf, Acta mater., **47**, 6 (1999) 1697-1712.
- 11.- R.E. Bolmaro, A. Fourty, A. Roatta, M.A. Bertinetti, P.A. Turner, and J.W. Signorelli, Scripta mater., **43** (2000) 553-559.
- 12.- D.P. Mika and P.R. Dawson, Acta mater., **47** (1999) 1355.
- 12.- D. Kuhlmann-Wilsdorf, Phil. Mag. A, **79**, 4 (1999) 955-1008.
- 13.- J.P. Hirth and R.W. Balluffi, Acta metall., **21** (1973) 929-942.
- 14.- W.T. Read Jr. Dislocations in Crystals, McGraw-Hill Publ. Co. Ltd. (1953). 181.
- 15.- H. Gleiter, E. Hornbogen and G. Baro, Acta metall., **16** (1968) 1053-1067.
- 16.- F. Bason and J.H. Driver, Mat. Sci. Eng. A, **256** (1998) 243-255.

### Agradecimientos

Trabajo financiado parcialmente por el acuerdo Argentina-Alemania AL/AEXII/18 y CONICET.