

# MODELIZACIÓN DEL DESARROLLO DE TEXTURAS EN COMPUESTOS BIFÁSICOS AL-CU

A. Fourty<sup>(1)</sup>, M.A. Bertinetti<sup>(1)</sup>, J.W. Signorelli<sup>(1)</sup>, R.E. Bolmaro<sup>(1)</sup> y H.-G. Brokmeier<sup>(2)</sup>

(1) Instituto de Física Rosario - Fac. de Cs.Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET- UNR. Rosario, Argentina.  
[fourty@ifir.ifir.edu.ar](mailto:fourty@ifir.ifir.edu.ar)

(2) Institut für Werkstoffkunde und -technik der Technische Universität Clausthal. GKSS Forschungszentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

En este trabajo se presentan texturas simuladas y medidas de compuestos bifásicos Al-Cu, para diferentes fracciones de volumen de cada fase, deformados en extrusión a una deformación equivalente de Von Mises igual a 3. Para la simulación se ha utilizado un modelo autoconsistente (Self Consistent SC) de 2-sitios que tiene incorporado un esquema de corrotación empírico entre granos. El código permite, además, tener en cuenta de manera explícita la probabilidad de que los granos vecinos que corrotan sean Al-Al, Al-Cu o Cu-Cu. Esta probabilidad depende de la fracción de volumen de cada fase. De esta forma puede considerarse una interacción diferente según las propiedades específicas de cada grano y de su vecino. En particular, se han obtenido muy buenos resultados imponiendo que los granos de Al sufran una fuerte interacción con su vecino, mientras que los granos de Cu tiendan a comportarse de manera más independiente de su compañero. Se muestra que el modelo utilizado es capaz de reproducir las texturas medidas por difracción de neutrones con un muy buen acuerdo tanto en sus componentes como en sus intensidades.

In this work simulated and measured textures of Al-Cu two-phase composites are presented, for different volume fractions of each phase, deformed to equivalent Von Mises Strains of 3.0. The simulation has been performed with a 2-sites Viscoplastic Self Consistent (SC) model, with an empiric co-spin scheme between first neighbor grains. Moreover, the code allows taking into account explicitly the probability that co-spinning neighbor grains be Al-Al, Al-Cu or Cu-Cu. This probability depends on the volume fraction of each phase. Therefore, a different interaction can be considered depending on the specific properties of each grain and its neighbor. Particularly, a good agreement has been obtained imposing a strong interaction between the Al grains and its companions; on the contrary the Cu grains tends to behave more independently. A good agreement with experimental neutron texture is obtained both in components and intensities.

## 1. Introducción

El desarrollo de heterogeneidades de deformación en materiales policristalinos se extiende a diferentes escalas. Cuando las heterogeneidades son producidas durante el régimen plástico, uno de los principales efectos se manifiesta en el desarrollo de texturas. Independientemente de la escala de la heterogeneidad el efecto que éstas comúnmente producen es el de suavizar las texturas. Estas escalas se podrían dividir de la siguiente manera:

1.- Heterogeneidad macroscópica: se extiende al tamaño de la muestra; abarca gran cantidad de granos. Este nivel de heterogeneidad es tenido en cuenta con Métodos de Elementos Finitos (FEM). En analogía con la nomenclatura de tensiones residuales, se hará referencia al mismo como "heterogeneidad de 1<sup>era</sup> clase o tipo" <sup>(1,2)</sup>.

2.- Heterogeneidad mesoscópica: se manifiesta entre granos vecinos, y se debe principalmente a la anisotropía plástica del cristal. Este problema usualmente se trata con modelos autoconsistentes (SC) <sup>(3,4)</sup> y FEM, mediante el esquema: "un grano, un elemento" <sup>(5,6)</sup>. Este nivel es llamado "heterogeneidad de 2<sup>da</sup> clase o tipo".

3.- Heterogeneidad microscópica: se desarrolla dentro de cada grano debido principalmente a arreglos de dislocaciones de diferentes orígenes ("3<sup>ra</sup> clase o tipo"). En este nivel el estudio se lleva a cabo con FEM mediante el esquema: "un grano, muchos elementos"

<sup>(7,8)</sup>. Recientemente se desarrollaron también modelos SC de n-sitios con el propósito de llevar adelante este estudio <sup>(9,10)</sup>.

El objetivo principal de la simulación del desarrollo de texturas es la predicción de las mismas mediante la comprensión de los fenómenos involucrados, tanto en las componentes presentes como en las intensidades de las mismas. Tanto la velocidad del desarrollo como la intensidad de las texturas están fuertemente influenciadas por pequeñas variaciones del tamaño de los granos, de la composición del material y de la velocidad de deformación, las que producen cambios en la energía de falla de apilamiento. A grandes deformaciones, la limitación principal en la simulación de texturas es la dificultad de predecir intensidades, llegando a ser la diferencia entre las intensidades medidas y predichas hasta de un orden de magnitud. Este desajuste proviene de la heterogeneidad (en sus tres escalas) que, en general, no es considerada en la simulación y que contribuye en diferentes grados al suavizado de la textura. Cada grano deforma de modo muy heterogéneo y alcanza la compatibilidad en deformación y equilibrio de tensiones desarrollando diferentes estructuras de dislocaciones. Dichas estructuras dependen de la orientación del grano y se interrelacionan de un modo aún no entendido totalmente. Este tema es tratado y discutido en numerosos trabajos <sup>(11-13)</sup>. Se ha observado que las dislocaciones se acumulan en regiones internas de los

granos donde desarrollan interacciones muy complejas, provocando consecuentemente deformación local y rotación de la red cristalina. Las experiencias también muestran grandes desorientaciones entre los diversos fragmentos desarrollados en el grano. Algunos arreglos de dislocaciones, producidos por Bordes de Dislocaciones Geométricamente Necesarias (GNDB) introducen desorientaciones mayores que otros arreglos, llamados Bordes de Dislocaciones Incidentales (IDB) o dislocaciones acumuladas estadísticamente. La orientación de los granos es también responsable de una distribución diferente de desorientaciones respecto a los dos arreglos principales de dislocaciones. En cada caso, el desarrollo de regiones de desorientación fuera de los bordes de granos originales es un hecho comprobado experimentalmente tanto a deformaciones altas como a intermedias. En materiales altamente deformados una de las características principales es también la presencia de Bandas de Deformación (DB). La técnica usada para caracterizar las DB ha sido la microscopía óptica. Mediante esta técnica se ha determinado el número de DB en cada grano en la dirección de laminado en muestras altamente deformadas y se observó que las mismas son cercanas a 2. Las DB usualmente son paralelas al plano de laminado mientras que los arreglos de dislocaciones conocidos como GNDB mantienen un ángulo medible usualmente no menor a 30° respecto al plano de laminado.

Se ha demostrado recientemente que el esquema de co-rotación aplicado a la simulación de texturas es capaz de efectuar una descripción bastante precisa no sólo de las texturas, sino también de los parámetros microscópicos medidos en materiales deformados, como desorientaciones promedio entre fragmentos de granos y distribuciones de desorientaciones. Observando que las desorientaciones entre las diferentes regiones que han soportado caminos de deformación diferentes pero compatibles, Hansen et al.<sup>(13)</sup>, mediante técnicas de SEM y TEM, encontraron que la frecuencia de los Bordes de Alto Ángulo (HAB) (>20°) es mucho mayor que la frecuencia estimada de los bordes de grano originales. En consecuencia queda claro que la rotación de las diferentes áreas no se concentra en los bordes de grano sino en los GNDB, IDB y DB creados durante la deformación.

## 2. Modelo micromecánico. Rotación de la red y fragmentación de los granos

El modelo empleado es Visco Plástico SC, cuyas principales características se presentaron en trabajos anteriores<sup>4, 9, 14, 15, 16</sup>. El comportamiento del material bajo un régimen viscoplástico puede ser descrito en términos de la tensión y de la velocidad de deformación:

$$\Sigma = f(\mathbf{M}, \dot{\mathbf{E}})$$

donde  $\Sigma$  es la tensión macroscópica,  $\dot{\mathbf{E}}$  es la velocidad de deformación macroscópica y  $\mathbf{M}$  es el módulo de compliancia viscoplástico del material. El comportamiento del cristal sigue una ley potencial que relaciona la tensión de corte aplicada  $\tau^s$  en cada plano con la tensión de corte crítica resuelta (CRSS) del

sistema  $\tau_c^s$ . La velocidad total de deformación  $\dot{\mathbf{e}}$  en cada grano se obtiene sumando las velocidades de deformación de corte  $\dot{\gamma}^s$  de cada sistema de deslizamiento potencialmente activo:

$$\dot{\mathbf{e}} = \left\{ \dot{\gamma}^s \sum_s \frac{\mathbf{m}^s \otimes \mathbf{m}^s}{\tau_c^s} \left( \frac{\mathbf{m}^s : \boldsymbol{\sigma}'}{\tau_c^s} \right)^{n-1} \right\} : \boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{M}^c [\boldsymbol{\sigma}'] : \boldsymbol{\sigma}'$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}'$  es la tensión deviatoria microscópica,  $\mathbf{m}^s = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^s \otimes \mathbf{b}^s + \mathbf{b}^s \otimes \mathbf{n}^s)$  es el tensor de Schmid que describe la geometría del sistema de deslizamiento en el cristal,  $\mathbf{n}^s$  es la normal al plano de deslizamiento,  $\mathbf{b}^s$  es la dirección de deslizamiento,  $\mathbf{M}^c$  es el módulo microscópico de compliancia y  $\dot{\gamma}_0$  es la velocidad de deformación de referencia. El módulo policristalino  $\mathbf{M}$  se calcula a través de la relación micro-macro (cristal-policristal), función de la respuesta individual de cada grano del agregado policristalino. Puede calcularse a partir de la aproximación secante o de la aproximación tangente:

$$\dot{\mathbf{E}} = \mathbf{M}^{\text{sec}} : \Sigma$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \mathbf{M}^{\text{tan}} : \Sigma + \dot{\mathbf{E}}^0$$

Los modelos SC imponen, a la interacción individual cristal-matriz, equilibrio local de tensiones dentro del volumen del agregado; pero no a la interacción grano-grano ya que no tienen en cuenta efectos espaciales de correlación. Resolviendo la ecuación de equilibrio para un dominio elipsoidal inhomogéneo embebido en un medio efectivo, se obtiene la ecuación de interacción en la cual se basan los modelos autoconsistentes:

$$(\dot{\mathbf{e}} - \dot{\mathbf{E}}) = \tilde{\mathbf{M}}^c : (\boldsymbol{\sigma} - \Sigma)$$

donde  $\tilde{\mathbf{M}}^c = n^{\text{ef}} (\mathbf{I} - \mathbf{S})^{-1} : \mathbf{S} : \mathbf{M}^{\text{sec}}$  es el tensor de interacción y  $\mathbf{S}$  es el tensor de Eshelby. Estas ecuaciones permiten establecer una relación entre los desvíos de tensión y desvíos de velocidad de deformación entre cada grano y el promedio. El parámetro  $n^{\text{ef}}$ <sup>(17)</sup> depende del tipo de interacción que se desea adoptar.

$$n^{\text{ef}} = \begin{cases} 0 & \longrightarrow \text{Taylor} \\ 1 & \longrightarrow \text{secante} \\ n & \longrightarrow \text{tangente}^{(18)} \\ \left[ 1 - 0.4(1/n - 1)^2 \right]^{-1} & \longrightarrow \text{sintonizad o FEM}^{(19)} \end{cases}$$

El parámetro  $n^{\text{ef}}$  sintoniza la 'dureza' del acople entre los desvíos de tensiones y los desvíos de velocidad de deformación asociados. La compliancia efectiva de la matriz se incrementa a medida que  $n^{\text{ef}}$  crece. Cuando  $n^{\text{ef}} = 0$ , la velocidad de deformación en los granos coincide con la promedio independientemente de los valores de tensión y se recupera un modelo tipo Taylor, con una matriz totalmente no-compliante. En el extremo opuesto, un

$n^{ef}$  'infinito' requiere que el desvío de tensión sea nulo y corresponde al modelo de Sachs. El parámetro sintonizado FEM proviene de un ajuste de resultados a nivel del policristal obtenidos con FEM, de inclusiones viscosas en un medio viscoso. Da valores de la compliancia intermedios entre el módulo secante y el tangente, aunque mucho más cercanos a este último. En todos estos casos se asume que la intensidad de la interacción entre los granos y la matriz es la misma para todos los granos.

Para la simulación tanto para el Al como para el Cu los sistemas de deslizamiento permitidos fueron los usuales  $\{111\} \langle 110 \rangle$ , y los exponentes de tensión se tomaron igual a 20. Se consideró una interacción casi secante entre inclusión y matriz ( $n^{ef} = 1.5$ ). Se consideró una ley de endurecimiento lineal con pendientes 4.2 para el Cu y 2.3 para el Al en unidades arbitrarias. La tensión de corte crítica resuelta fue parametrizada de manera que la del Cu fuese el doble que la del Al, la cual se tomó arbitrariamente igual a 1.0 en las mismas unidades arbitrarias. La corrotación se consideró diferente según los granos apareados fuese Al-Al, Al-Cu o Cu-Cu, tomándose más débil para los pares Cu-Cu. Esto permite que el comportamiento del Cu esté menos influenciado por su vecino.

### 3. Resultados experimentales

Los datos experimentales consisten en texturas medidas por difracción de neutrones en GKSS Research Center Geesthacht, Germany. Los compuestos Al-Cu se prepararon a partir de polvos de metal puro tamizado de manera que, en promedio, el tamaño de los granos fuese de 100  $\mu\text{m}$ . Luego de una mezcla homogénea los polvos fueron uniaxialmente precompactados y deformados por extrusión a temperatura ambiente. Dicho procedimiento se repitió para diversas composiciones, variando las fracciones de volumen de las fases cada 10%. Las figuras de polo para Al (111), (200), (220) y Cu (111), (200) con superposición parcial entre Al(200) y Cu(111) se midieron mediante un barrido unidimensional en  $\chi$ . La difracción de neutrones permite mediciones sumamente precisas aún para bajas fracciones de volumen. Las texturas se procesaron por técnicas WIMV y por armónicos, y se obtuvieron Funciones de Distribución de Orientaciones (ODF) y Figuras de Polos Inversas (IPF). Especificaciones completas de los datos experimentales se encuentran disponibles en un trabajo previo<sup>(20)</sup>.

### 4. Resultados y Discusión

La figura 1 muestra una representación esquemática de los granos donde se muestra los GNDB. Los IDB no se muestran en el esquema y no se los considera en este modelo. En el esquema de corrotación cada grano deforma siguiendo el modelo viscoplastico autoconsistente pero rota junto con un compañero como una entidad única<sup>(10)</sup>. Estadísticamente cada grano representa así sólo la mitad de una entidad. La otra parte está ligada a un compañero diferente elegido al azar. Las dos partes que forman el mismo grano están inicialmente orientadas en la misma dirección pero rotarán y deformarán siguiendo la influencia de su vecino más cercano.

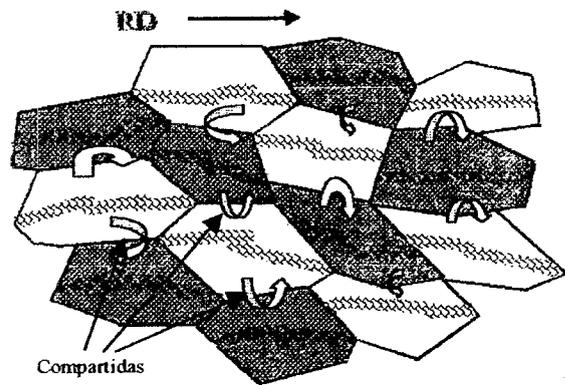


Figura 1: Representación esquemática de los granos donde se muestran los Bordes de Dislocaciones Geométricamente Necesarias (GNDB) y la corrotación entre ellos.

La Figura 2 muestra las funciones de densidad de probabilidad de los ángulos de desorientación, normalizados por la desorientación promedio en función de la desorientación normalizada con la desorientación promedio para cada paso de deformación. El ajuste se realizó mediante una distribución Lognormal y el acuerdo con los resultados experimentales es tan bueno como podría esperarse a partir de la naturaleza probabilística del fenómeno involucrado en la fragmentación. El ángulo de desorientación promedio también muestra un buen acuerdo con los resultados experimentales<sup>(15)</sup>.

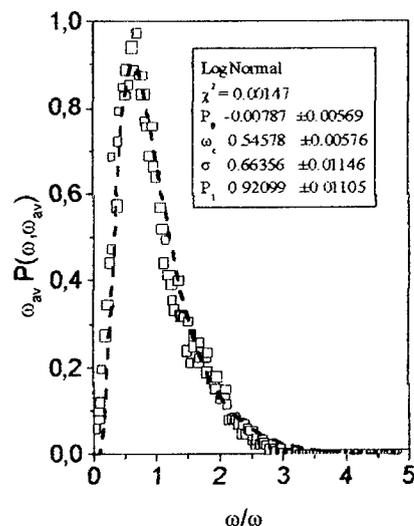


Figura 2: Ángulos de desorientaciones para las deformaciones predichas ajustados por una distribución normal

El arreglo cristalino supuesto para la simulación es el apropiado para calcular la evolución de la desorientación entre dos partes de un grano (desorientación intragranular) y entre todos los granos (desorientación dependiente de la textura). La desorientación entre dos vecinos que no pertenecen al mismo cristal original se mantiene constante asumiendo que los bordes de grano son estables desde el punto de vista de la orientación. El ángulo de

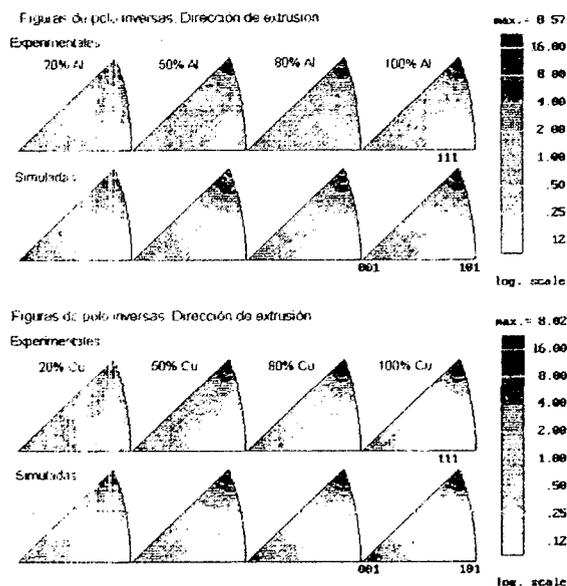


Fig. 3: Figuras de polos inversas, experimentales y simuladas

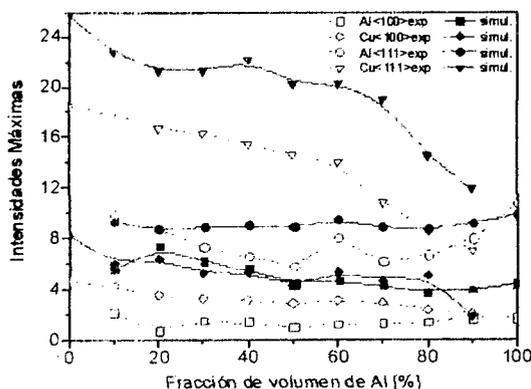


Figura 4: Evolución de las intensidades con la fracción de volumen de Al y Cu.

desorientación entre partes del mismo grano se incrementa debido a la fuerte interacción con su compañero. Las diferentes fracciones de volumen para cada fase han sido consideradas suponiendo tantos vecinos Al-Al, Al-Cu y Cu-Cu como se espera estadísticamente para cada composición particular.

En la figura 3 se muestran las figuras de polo inversas en la dirección de extrusión medidas y simuladas para diferentes fracciones de volumen de cada fase. En la figura 4 se representa la evolución de las intensidades de los polos (100) y (111) para el Cu y el Al, para todo el rango de variación de fracciones de volumen de las fases. Puede observarse que se ha logrado un buen acuerdo tanto en los componentes como en sus intensidades máximas para cada fase, si bien se sigue observando que la simulación sobrestima ligeramente los valores experimentales. Este mejor ajuste en los resultados de la simulación se ha logrado a partir de considerar las heterogeneidades de 2<sup>da</sup> y 3<sup>ra</sup> clase. La heterogeneidad de 3<sup>ra</sup> clase se ha contemplado al permitirle a los granos "fragmentar" compartiendo la rotación con su vecino, simulando así la generación de

los HAB. La ligera sobrestimación en las intensidades se debe posiblemente a que no se ha considerado la heterogeneidad macroscópica (1<sup>ra</sup> clase). Recientemente se han efectuado cálculos en los cuales el gradiente de velocidad de deformación impuesto considera los efectos del corte producido durante la extrusión. Estos resultados preliminares muestran aún un mejor ajuste.

**Agradecimientos:** Este proyecto fue parcialmente financiado por el Acuerdo Intergubernamental Argentino-Alemán # ARG 6 L1A 1A/2 y CONICET-Argentina.

### Referencias

- 1.- P.R. Dawson and A. J. Beaudoin. J. of Metals, 49, 34, 1997.
- 2.- S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst and L. Anand. J. Mech. Phys. Solids, 40, 537, 1992.
- 3.- A.Molinari, G.R. Canova and S. Ahzi. Acta metall., 35, 2983, 1987.
- 4.- R.A.Lebensohn and C.N. Tomé. Acta metal. Mater., 41, 2611, 1993.
- 5.- A.J. Beaudoin, P.R. Dawson, K.K. Mathur and U.F. Kocks. Int. J. Plast., 11, 501, 1995.
- 6.- G. B. Sarma and P.R. Dawson. Int. J. of Plast., 12, 1023, 1996.
- 7.- D.P. Mika and P.R. Dawson. Acta mater., 47, 1355, 1999.
- 8.- A.J. Beaudoin, H. Mecking and U.F. Kocks. Phil. Mag. A, 73, 1503, 1996.
- 9.- G.R. Canova, H.-R. Wenk and A. Molinari. Acta metall. mater., 40, 1519, 1992.
- 10.- R.A. Lebensohn and G.R. Canova. Acta mater., 44, 3687, 1997.
- 11.- N. Hansen and D. Juul Jensen. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 357, 1447, 1999.
- 12.- D.A. Hughes, Q. Liu, D.C. Chrzan and N. Hansen. Acta mater., 45, 105, 1997.
- 13.- D.A. Hughes and N. Hansen. Acta mater., 45, 3871, 1997.
- 14.- R.E. Bolmaro, A. Fourty and H.-G. Brokmeier. Text. and Micr., 33, 125, 1999.
- 15.- R.E. Bolmaro, A. Fourty, A. Roatta, M.A. Bertinetti, P.A. Turner and J.W. Signorelli. "A New Approach to Crystal Spin .....". Accepted in Scripta mater..
- 16.- A.Molinari, G.R. Canova and S. Ahzi. Acta metall., 35, 2983, 1987.
- 17.- C.N.Tomé. Modelling Simul. Mater. Sci.Eng. 7, 723-738, 1999.
- 18.- J.W.Hutchinson. Proc. R. Soc. A 348, 101-127, 1976.
- 19.- A.Molinari and L.S. Tóth. Acta Metall. Mater. 42, 2453-2458, 1994.
- 20.- H. Gertel-Kloos, H.-G. Brokmeier and H.J. Bunge. Mat. Sci. Forum, 157-162, 685, 1994.