

# ORDEN ORIENTACIONAL DE CORTO ALCANCE. INFLUENCIA DE SU EVOLUCION SOBRE EL DESARROLLO DE TEXTURAS.

A. Roatta<sup>(1)</sup>, A.L. Fourty<sup>(1)</sup>, M.A. Bertinetti<sup>(1)</sup>, J.W. Signorelli<sup>(1)</sup>, P.A. Turner<sup>(1)</sup>, C.T. Necker<sup>(2)</sup>, J. Bingert<sup>(2)</sup> y R.E. Bolmaro<sup>(1)</sup>.

(1) Instituto de Física Rosario-Fac. Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. CONICET-UNR. Rosario. Argentina.  
*e-mail: bolmaro@ifir.ifir.edu.ar*

(2) Los Alamos National Laboratory. MST-6. Los Alamos. New Mexico. U.S.A..

El desarrollo de la textura en materiales bifásicos está fuertemente influenciado por las interacciones elasto-plásticas que se establecen entre las fases durante el proceso de deformación. Los modelos basados en la hipótesis de Taylor desprecian dichas interacciones y la reorientación de cada cristal está principalmente determinada por la orientación del cristal respecto al sistema laboratorio. En los modelos autoconsistentes de 1 sitio (1-SSC) tales interacciones son dependientes de la orientación de cada cristal respecto al promedio de variables de campo representadas por la matriz. Los modelos autoconsistentes de 2 sitios (2-SSC) son similares a los de 1 sitio excepto que consideran las interacciones como función de las orientaciones relativas de pares de granos tomados como vecinos permanentes más próximos. En estos modelos las orientaciones relativas de los primeros vecinos son necesariamente parámetros de entrada y pueden ser también una posible salida de la simulación. La información experimental acerca de correlación de orientaciones de corto alcance entre fases, antes o después de la deformación, no es abundante. Este trabajo muestra algunos resultados preliminares obtenidos a partir de compuestos de Ag-Ni laminados hasta deformaciones equivalentes de Von Mises de 2.6 comenzando desde el material de partida, y para algunas deformaciones de laminado intermedias. Los resultados muestran que las desorientaciones de corto alcance permanecen prácticamente sin cambio a través del proceso de deformación. Se esboza y fundamenta un modelo de reorientación que podría explicar ciertos desarrollos de textura característicos de materiales bifásicos.

Texture development in two-phase materials is highly influenced by the elasto-plastic interactions established between phases during the deformation process. Taylor type models neglect such interactions and the reorientation of each crystal is mainly determined by the orientation of the crystal with respect to a laboratory system. In 1-Site Self-Consistent (1-SSC) models such interactions are dependent on the orientation of each crystal with respect to the average of field variables represented by the matrix. 2-Sites SC (2-SSC) models are similar to the 1-site models except they consider interactions functions of the relative orientations of pairs of grains taken as the closest permanent neighbors. In these models the relative orientations of the first neighbors are necessary as input parameters and can also be a possible output of the simulations. The experimental information about short range orientation correlation between phases, either before or after deformation, is not abundant. The current work shows some preliminary results collected from Ag-Ni composites rolled to Von Mises equivalent strains of 2.6 for the starting random material and some intermediate rolling strains. The results show that short range misorientation remains almost unchanged throughout the deformation process. A reorientation model is outlined that can explain some texture development characteristics of two-phase materials.

## 1. Introducción

El desarrollo de textura por deformación se describe a través de la evolución de la Función de Distribución de Orientaciones (ODF) en el espacio de orientaciones de Euler<sup>(1)</sup>. La ODF resultante depende de la estructura cristalina y de las características de los ensayos mecánicos (paso de deformación, velocidad de deformación, temperatura, etc.). Dejando de lado las texturas de recristalización y/o transformaciones de fase, el desarrollo de textura por deformación se comprende a un nivel razonablemente bueno, al menos en sus aspectos cualitativos. Sin embargo, considerando los resultados cuantitativos de simulaciones y/o predicciones, el éxito de los modelos actuales es de poco valor. Se argumenta que la principal razón de tales discrepancias cuantitativas está dada por las inhomogeneidades de las deformaciones no consideradas apropiadamente por los modelos de Taylor o autoconsistentes. Un mayor nivel de complejidad ha sido logrado refinando las teorías

autoconsistentes<sup>(2)</sup>. Sin embargo, el acuerdo cuantitativo es aún una tarea eludida y las componentes menores de textura son consideradas usualmente no merecedoras de mayores esfuerzos de simulación.

Las deformaciones son las componentes del gradiente de deformación mejor comprendidos por la teoría del continuo y por los modelos micromecánicos. Debido a la simetría del tensor de tensiones faltan las ecuaciones constitutivas relacionando el spin con las tensiones aplicadas. Este punto que ha sido llamado el eslabón perdido de la mecánica del continuo, el spin o la componente antisimétrica del gradiente de velocidades, debería ser estudiado en detalle<sup>(3)</sup>. La naturaleza de la reorientación de granos ha merecido un gran esfuerzo por casi todos los autores que se han dedicado al estudio del desarrollo de textura<sup>(4,5,6)</sup>. El único acuerdo logrado es: el tema es muy complicado, sólo puede ser resuelto en forma aproximada y toda solución cinética proviene más de la geometría de la deformación que de las ecuaciones constitutivas entre tensiones y deformaciones.

Estudios más detallados acerca de la orientación de granos pueden realizarse mediante el concepto de Función Distribución de Desorientaciones (MDF) la cual describe estadísticamente la correlación de orientaciones entre cada grano y todos los posibles vecinos. La cantidad de información que puede ser recogida mediante técnicas de Difracción de Electrones Retrodifundidos (EBSD) es de difícil interpretación<sup>(7)</sup>, conduciendo al análisis por medio de las MDF. El objetivo de este trabajo es la comparación de la llamada Función Distribución de Desorientaciones Correlacionada (CMDF), la cual describe la distribución estadística de granos primeros vecinos, y la MDF no correlacionada, la cual describe la distribución estadística de desorientaciones entre todo par potencial de granos. El propósito es el estudio de la evolución de ambas funciones para un material bifásico en función de la deformación plástica. Ambas funciones están restringidas por la medición de la correlación entre fases de forma tal que cada par de granos de la CMDF esté compuesto por diferentes fases y que la MDF no correlacionada sea calculada usando la ODF de cada fase individual.

## 2. Experimentos

Los detalles de la preparación de muestras han sido descritos anteriormente<sup>(8)</sup>. Las mediciones fueron realizadas mediante el análisis de los Patrones de difracción de Electrones Retrodifundidos (EBSP) en un SEM. Fueron usados la captura manual de patrones de Kikuchi y el análisis e indexación automáticos. La CMDF fue medida y la MDF no correlacionada fue calculada para una fase con respecto a la otra en cada paso de deformación.

La distinción óptica entre ambas fases se obtiene fácilmente mediante pulido y ataque químico pero las superficies muy planas y suaves no se logran con la calidad necesaria para captura automática y análisis de los patrones de Kikuchi. Ambas fases presentan diferentes durezas y reactividad química las cuales impiden la obtención de superficies de perfecta calidad para EBSP. Superficies con grandes desniveles entre ambas fases provocan que, para bajo ángulo de incidencia, el haz se vea obstaculizado por la presencia de la fase de mayor nivel para alcanzar la fase de menor nivel. Los patrones de mejor calidad fueron obtenidos puliendo 30 minutos con alúmina de 1  $\mu\text{m}$  seguido por 30 minutos con alúmina de 0.3  $\mu\text{m}$ . Aún en este caso los bordes de grano resultaron fácilmente visibles entre Ag y Ni pero no entre granos de la misma fase. El barrido fue realizado manualmente manteniendo la distancia entre determinación de orientaciones de Ag y Ni en aproximadamente 5  $\mu\text{m}$ , medida que está entre un medio y un décimo del tamaño de grano promedio. Las orientaciones cristalinas fueron automáticamente calculadas usando OIM-TLS software comercial de análisis<sup>(9)</sup>. Aproximadamente 500 pares Ag-Ni fueron medidos para cada paso de deformación. La figura 1 muestra los resultados en la representación ángulo-eje para muestras 50%Ag-50%Ni y la figura 2, resultados similares para una muestra laminada hasta deformación

de Von Mises de 2.2.

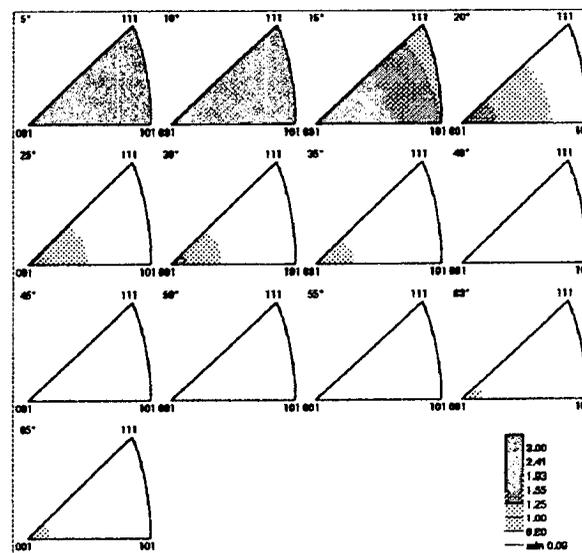


Fig. 1. Función de distribución de desorientaciones correlacionadas en Ag-Ni en muestras de partida

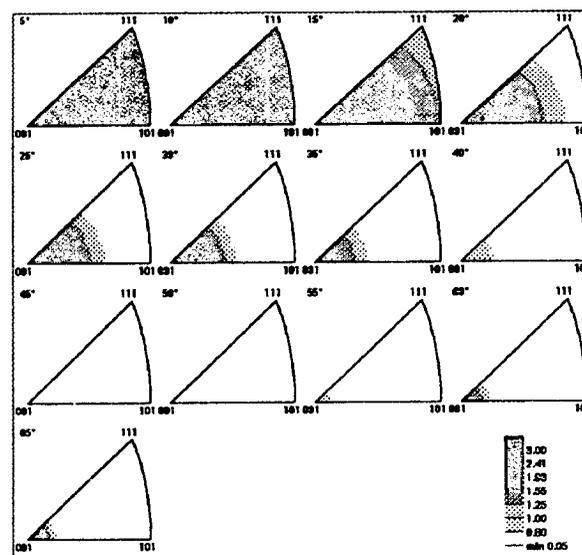


Fig. 2. Función de distribución de desorientaciones correlacionadas en Ag-Ni en muestras laminadas al 80%

## 3. Descripción del Modelo

En los siguientes párrafos esbozaremos un modelo de reorientación que será llamado Modelo de Dominio ReOrientado (RODM). Cada grano está en contacto con muchos granos que serán considerados como los más cercanos o primeros vecinos. Los otros, en número creciente, son los segundos, terceros y así sucesivamente n-ésimos vecinos. Se supone que la interacción elastoplástica es mayor entre vecinos más cercanos que entre cristales más alejados uno de otro. La aplicación exitosa de los modelos autoconsistentes se asume que es una consecuencia directa de la

relajación espacial de la interacción. En muchos materiales inhomogéneos, por el contrario, han sido encontradas influencias significativas a grandes distancias de inclusiones duras<sup>(10)</sup>.

Muchos modelos de desarrollo de textura no informan el mecanismo por el cual a cada cristal se le permite rotar libremente con el objeto de caber en el agujero que el resto de los granos, considerados como matriz en los modelos autoconsistentes, le han dejado. No se espera que los granos sean libres por sí mismos de rotar y readherirse a los granos vecinos una vez que la reorientación ha finalizado. Es bastante más probable que los granos traten de lograr compatibilidad de tensiones a través de alguno de los siguientes mecanismos:

- estirándose y rotando juntos en un área mayor, que comprende más que un único cristal. Estas áreas o dominios serán mayores si los mecanismos de borde de grano que acomodan la inhomogeneidad de la deformación demandan mayor energía o son muy dependientes de la estructura de borde de grano.

- fragmentándose de forma tal que la zona de frontera de cada grano no experimente reorientación con respecto al grano primer vecino. El cambio de orientación a lo largo de un grano estaría compuesto por grandes áreas sin ningún cambio y pequeñas áreas de bruscos cambios concentrados de orientación.

Una textura muy simplificada sería la descrita por una ODF con sólo una componente, más o menos intensa. La comprensión del problema en términos de orden y desorden nos permite consignar al sistema como perfectamente ordenado si todos los granos están alineados a lo largo de la orientación descrita por tal componente. En tal caso órdenes de corto y largo alcance son indistinguibles uno de otro. Un material bifásico con las mismas características sería representado por dos ODF diferentes con una componente de textura cada una, ambas bien definidas e intensas. Dos granos vecinos pertenecientes a fases diferentes estarían desorientados, estadísticamente hablando, por los mismos ángulos de Euler no importa cuán lejos estén uno de otro. En ambos casos la MDF y la CMDF serían absolutamente iguales (entendiendo a la CMDF como la MDF que mide la probabilidad de desorientación entre primeros vecinos de fases diferentes). En materiales menos orientados algunos granos, que podrían ser mayoría, estarán orientados en una dirección y el resto en alguna otra dirección que puede constituir una componente diferente o sólo granos orientados al azar (background). Así, la tarea de caracterizar el orden interno entre granos es más difícil ahora porque cada grano debe estar relacionado con el resto no sólo por la orientación relativa sino también por el vector que va de un grano al otro. Entre las principales funciones de probabilidad usadas para describir el orden en un material policristalino, la MDF no correlacionada y la CMDF son las que miden la desorientación de granos en dos casos: cuando las coordenadas de ambos granos no se consideran y cuando ambos granos son primeros vecinos. Estrictamente hablando las MDF son funciones del vector ubicado entre dos puntos y pueden ser

consideradas como funciones casi continuas si se consideran muchos efectos de desorientación interna (Dislocaciones Geométricamente Necesarias GNB, Paredes de Dislocaciones Densas DDW, Micro Bandas MB, Bloques de Celdas CB, etc.) Sin embargo la naturaleza discreta del material mostrará discontinuidades bruscas en las MDF. Una de las preguntas que surgen a partir de la discusión es si la desorientación creada entre primeros vecinos se debe principalmente a los mecanismos de fragmentación intragranular (desorientación acumulada en el interior del grano) o se debe a la desorientación de bordes de grano (la cual daría mayor validez a la hipótesis usual hecha para el cálculo de rotación del grano).

Si los bordes de fases no pueden absorber reorientaciones relativas entre fases tan rápido como se espera a partir de los desarrollos usuales de textura, la CMDF mostrará una evolución más lenta que la MDF. En tal caso la textura se desarrollará usando uno de los siguientes mecanismos o una combinación de ellos: a) fragmentación de granos a expensas de uno o varios de los mecanismos descriptos previamente o b) mecanismos de reorientación colectiva que pueden comprender unos pocos granos rotando juntos tomando ventaja de un débil Borde de Dominio ReOrientado (RODB). Cuanto mayor sea el número de granos que compone tal RODB menor será la intensidad de la textura desarrollada. El desorden local entre vecinos más cercanos y la necesidad de rotar para obtener la textura promedio macroscópica deben ser compatibles. Pero aún si el RODB se limita a una combinación de granos de dos fases diferentes, o a una porción de ellos, es evidente la necesidad de distribución distinta de rotaciones.

Siempre puede argumentarse que un cálculo de FEM a un nivel de discretización mucho menor que el tamaño de grano podría capturar la desorientación entre las diferentes áreas intragranulares. Es de todos modos improbable que tal tipo de modelos pueda describir detalladamente la gran variedad de arreglos de dislocaciones y su influencia concomitante sobre las intensidades de la textura.

#### 4. Discusión y Conclusiones

La MDF puede tener muchos máximos pero si el proceso de deformación es continuo se supone que la intensidad de todos los máximos se incrementa uniformemente (pero no necesariamente en forma lineal) desde cero a un valor característico del proceso mecánico.

Vemos que la reorientación o rotación de los granos es probablemente una consecuencia de un comportamiento rotacional local colectivo. Existe un arreglo de corto alcance que es difícil de cambiar aun a niveles medios de deformación. Aquellos dominios estables rotacionalmente permanecen con las mismas orientaciones relativas a lo largo de grandes caminos de deformación. Esos dominios están probablemente conectados unos a otros por interfases mucho más débiles y/o desarrollan desorientaciones inter-dominios acumulando gradualmente rotaciones por desorientación de paredes de celdas, desarrollo de

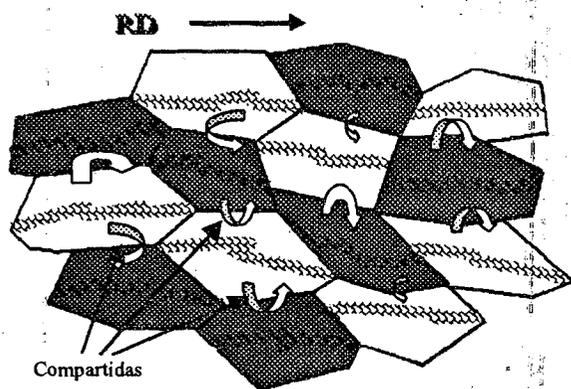


Fig. 3 Representación esquemática de rotaciones compartidas de granos fragmentados.

subgranos o cualquier otra inhomogeneidad en el gradiente de velocidades. La fig. 3 muestra una representación esquemática de un conjunto de granos que desarrollan desorientaciones intra-grano mediante algún arreglo de dislocaciones. Con este modelo la rotación es mejor calculada promediando a través de dos granos considerados como parte del dominio local. Mayor el dominio (la mayor cantidad de granos incluidos en tal arreglo local de desorientaciones estables) menor la textura. Más granos que puedan rotar libremente producirán texturas más fuertes. La rigidez de la textura de alguna fase en materiales bifásicos puede ser explicada por la disminución del tamaño del dominio inducido por interfases débiles. En tal caso granos únicos están rotando en una matriz que no impide la rotación de los granos.

El modelo actual resulta ser una justificación del modelo co-rotacional o aproximación de rotación compartida implementada en modelos autoconsistentes por uno de los autores<sup>(11,12)</sup>. La evidencia experimental es bastante débil y merece mayor investigación.

## 5. References

1. Kocks, U.F., Tomé, C.N. and Wenk, H.-R. Texture and Anisotropy. Cambridge University Press (1998).
2. Molinari, A., Canova, G.R. and Ahzi, S., Acta metall. Vol. 35, pp. 2983-2994 (1987).
3. Dawson, P.R. and Marin, E. B., Adv. Appl. Mech., Vol. 34, pp. 77-169 (1998).
4. Kocks, U.F., Dawson, P.R. and Fressengeas C., J. Mech. Behaviour of Mat., Vol. 5, 2, pp.107-128 (1994).
5. Bolmaro, R.E., Text. And Microstructures, Vol. 22, pp. 187-198 (1994).
6. Van der Giessen, E. and Van Houtte, P., Mech. Mater., Vol 13, pp.93-115 (1992).
7. Wright, S. I., Adams, B.L. and Kunze, K., Mat. Sci. Eng., Vol. 160 A, pp. 229-240 (1993).
8. Bolmaro, R.E., Browning, R.V., Guerra, F.M. and Rollet, A.D., Mat. Sci. Eng., Vol 175 A, pp. 113-124 (1994).
9. TexSEM Laboratories, Inc. Orientation Imaging Microscopy. Software Version 2.0. User Manual (1996).

10. Bolmaro, R.E., Guerra, F.M., Kocks, U.F., Browning, R.V., Dawson, P.R., Embury, J.D. and Poole, W.J., Acta metall. mater., Vol. 41, 6, pp. 1893-1905 (1993).
11. Bolmaro, R.E., Lebensohn, R.A. and Brokmeier, H.-G., Comp. Mat. Science. Vol. 9, pp. 237-250 (1997).
12. Bolmaro, R.E., Fourty, A. and Brokmeier, H.-G., Mat. Sci. Forum., Trans. Tech. Publ., Ed. R. Delhez and E.J. Mittemeijer (1998).

**Agradecimientos:** Este trabajo fue realizado durante la estadia de uno de los autores en Los Alamos National Laboratory (R.E. Bolmaro) financiada por J. W. Fulbright Foreign Scholarship Board.

CEILAP  
CITEFA - CONICET  
ZUFRIATEGUI Y VARELA  
1603 - VILLA MARTELLI  
REPUBLICA ARGENTINA