

# PREDICCIÓN DE TEXTURAS DE LAMINADO EN METALES CON ESTRUCTURA HEXAGONAL UTILIZANDO MODELOS POLICRISTALINOS MULTI-SITIO

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

Instituto de Física Rosario - Fac. de Cs. Exactas, Ingeniería y Agrimensura CONICET- UNR. Rosario, Argentina.

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

En este trabajo se analiza la validez de la aproximación multi-sitio en la predicción de texturas de laminado en metales HCP. Los modelos multi-sitio se caracterizan por la inclusión de una tercera escala en la descripción del material ("microscópica-mesoscópica-macroscópica"), en lugar de la aproximación clásica a dos escalas ("microscópica-macroscópica"). La utilización de estos modelos conlleva como hipótesis que la deformación en cada grano es influenciada fuertemente por el comportamiento de los granos adyacentes.

Las predicciones obtenidas se comparan con datos experimentales y son discutidas en términos de la actividad de los sistemas de deslizamiento activos y el esquema de homogeneización empleado.

In the present work the validity of a multisite modeling approach for the prediction of rolling textures of hexagonal metals is analyzed. These models require the definition of three different scales: the microscopic, the mesoscopic and the macroscopic scales, instead of the classical two - micro and macro - scales. The underlying hypothesis is that the deformation of each grain is significantly influenced by the interaction with a limited number of the adjacent grains. The predictions are compared with experimental measurements and they are discussed in terms of the relative activation of slip systems and the homogeneization scheme.

## INTRODUCCIÓN

Los modelos de desarrollo de textura pueden clasificarse según el tipo de interacción que suponen entre el grano individual, la matriz y las condiciones de borde impuestas al policristal. A nivel microscópico el comportamiento se describe en base a la teoría de plasticidad cristalina. En el presente trabajo, la relación entre la velocidad de deformación y la tensión queda establecida mediante una ley constitutiva del tipo viscoplástica. Históricamente diversas técnicas de homogeneización han sido utilizadas para definir la transición de la escala microscópica a la escala macroscópica: Taylor (FC) [1], Sachs [2], modelo de condiciones relajadas (RC) [3] y modelos autoconsistentes (SC) [4]. En metales con red cristalina de simetría cúbica, los modelos que suponen una deformación homogénea del agregado policristalino predicen razonablemente el desarrollo de la textura y de la anisotropía mecánica asociada. Sin embargo, en el caso de materiales con estructura cristalina hexagonal la hipótesis de deformación homogénea parece no ser suficiente para predecir en forma satisfactoria la evolución de la textura del material deformado. Las predicciones pueden ser mejoradas considerablemente si se considera la

heterogeneidad local del gradiente de velocidad inducido por la interacción entre granos vecinos. Esta última afirmación ha sido demostrada utilizando diferentes esquemas numéricos (Molinari [5], Lebensohn [4]). El objetivo de este trabajo consiste en analizar la respuesta en materiales HCP de diversos modelos multi-sitio:

- modelo de lamelas (LM) originalmente propuesto por Van Houtte [6] y aplicado en forma exitosa en materiales cúbicos.
- modelo SC-RC desarrollado para el tratamiento de estructuras lamelares como las aleaciones  $\gamma$ -Ti-Al [7].
- modelo SC-FC que propone que, localmente, los granos vecinos tienen un comportamiento próximo al borde superior (límite de Taylor). La respuesta global es obtenida por homogeneización autoconsistente.

Los materiales de estructura HCP usualmente presentan una mayor anisotropía plástica respecto a los materiales cúbicos. Además, se caracterizan por tener una marcada diferencia en la capacidad de acomodar deformación según ésta sea paralela o perpendicular a la dirección  $\langle a \rangle$  del cristal.

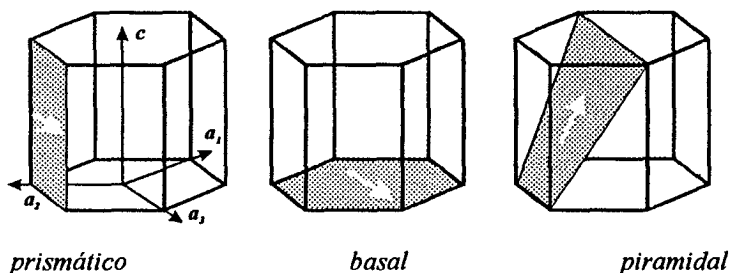


Figura 1: Ilustración de los modos de deformación observados a alta temperatura en cristales HCP. Los planos de deslizamiento están sombreados y las flechas indican la dirección del vector de Burgers (dirección de deslizamiento).

A temperatura elevada, la elongación o compresión del cristal en la dirección  $\langle c \rangle$  solamente puede darse por movimiento de dislocaciones cuyo vector de Burgers sea del tipo  $\langle c+a \rangle$  (Figura 1). En base a los trabajos de Tenckoff [8] y de Funderberger [9], se estima que la resistencia de las dislocaciones del tipo piramidal ( $P\langle c+a \rangle$ ) es de 6-10 veces mayor que la que presentan las dislocaciones asociadas a los sistemas de deslizamiento prismático ( $Pr\langle a \rangle$ ) o basal ( $Ba\langle a \rangle$ ). Consecuentemente, la activación de los diferentes modos de deformación implica una heterogeneidad a escala del cristal, la que se propaga a escala del agregado local o vecindad inmediata. Esta última afirmación explica por qué los modelos que no asumen homogeneidad del campo de deformación predicen desarrollos de texturas más cercanos a los experimentales.

### MODELOS MULTI-SITIO

Los modelos multi-sitio en general se caracterizan por la suposición de que cada grano del policristal interactúa con un número limitado de vecinos directos, teniéndose esto en cuenta mediante la incorporación de una tercera escala al esquema clásico "micro-macro". Así, además de la escala microscópica a nivel del grano y la escala macroscópica a nivel del policristal, se define una escala intermedia, la mesoscópica, que comprende un número limitado de granos.

A escala microscópica, el comportamiento de cada grano queda descrito por la ecuación viscoplástica, la cual relaciona la velocidad de deformación  $\dot{\epsilon}$ , con la tensión  $\sigma'$  de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\gamma}_0 \sum_s m^s \left( \frac{m^s : \sigma'}{\tau_0^s} \right)^n$$

donde  $\tau_0^s$  y  $m^s$  son la tensión crítica y el factor de Schmid del sistema  $s$ ;  $\dot{\gamma}_0$  es la velocidad de deslizamiento de referencia y  $n = 1/m$ , siendo  $m$  la sensibilidad a la velocidad de deformación.

A escala macroscópica, la respuesta del policristal se determina a través del esquema de homogeneización que define el comportamiento global como promedios de las magnitudes locales. En este trabajo se utilizan dos esquemas de homogeneización diferentes:

a) Taylor (FC): establece que la deformación es homogénea en el policristal. Sus ecuaciones características son:

$$\begin{cases} \dot{\epsilon} = \dot{E} \\ \dot{E} = M^P : \Sigma' \\ M^P = \langle M^c \rangle \end{cases}$$

donde  $\dot{E}$  es la velocidad de deformación del policristal,  $M^P$  es el módulo secante macroscópico y  $M^c$  es el módulo secante de cada grano.

b) Autoconsistente (SC): los valores macroscópicos tanto de deformación como de tensión se obtienen como promedio de los estados locales de deformación y tensión respectivamente.

$$\begin{cases} \dot{E} = \langle \dot{\epsilon} \rangle \\ \Sigma' = \langle \sigma' \rangle \\ \dot{E} = M^P : \Sigma' \\ M^P = \langle M^c : B^c \rangle \end{cases}$$

donde  $B^c$  es el tensor de acomodación función de las propiedades del medio efectivo  $M^P$  y de la forma del grano.

A escala mesoscópica, se define la forma en la que los granos vecinos interactúan entre sí. La Figura 2 esquematiza las diferentes escalas: localmente cada grano está sometido a un estado de deformación y tensión  $\dot{\epsilon}^g, \sigma'^g$ ; a nivel mesoscópico el par de granos vecinos soporta un estado  $\dot{\epsilon}^{par}, \sigma'^{par}$ ; el cual a su vez debe respetar las relaciones de homogeneización

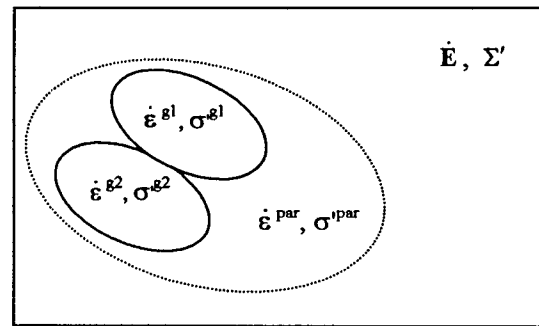


Figura 2: Esquema de interpretación de magnitudes microscópicas, mesoscópicas y macroscópicas.

$\dot{E} = \langle \dot{\epsilon}^{par} \rangle, \Sigma' = \langle \sigma'^{par} \rangle$ . La deformación aplicada al par de granos en conjunto, se obtiene como el promedio de la velocidad de deformación de cada uno de los granos:

$$\dot{\epsilon}^{par} = w_1 \dot{\epsilon}^{g1} + w_2 \dot{\epsilon}^{g2}$$

siendo  $w_1$  y  $w_2$  los pesos relativos de los granos 1 y 2 respectivamente.

En los procesos de laminado, donde los granos adquieren una forma achatada, es necesario contemplar de modo particular la influencia de la morfología durante la co-deformación de los granos del par. Se considera que ambos granos tienen inicialmente la misma forma y tamaño, y se encuentran uno encima del otro, siendo la superficie de separación paralela a la dirección de laminado. La definición explícita de la forma en la cual el par de granos interactúa define el modelo a escala mesoscópica. En este trabajo las diferentes variantes que se han analizado pueden englobarse bajo lo que se denomina RC. La condición de relajación consiste en permitir que ciertas componentes del tensor de deformación posean un corte adicional. Así, el requerimiento estricto de homogeneidad de deformación para todas las componentes del tensor gradiente de velocidad de deformación ( $L^{grano}$ ), es parcialmente dejado de lado. En el caso de laminado se ha puesto la restricción de que sólo las componentes de deformación actuantes sobre las caras paralelas al plano de laminado puedan relajarse. Esta aseveración se basa en el hecho de que la

diferencia en el corte generado entre los granos puede ser acomodada sin grandes incompatibilidades espaciales. Asimismo, se asume que el corte adicional que se genera no produce deslizamientos a lo largo de la superficie de separación de ambos granos.

En la Figura 3 se representan los modos de relajación utilizados, denominados Tipo I, Tipo II y Tipo III [10,11]. Se incluye el caso sin relajación como referencia (Tipo 0).

- Tipo 0: no se permite relajación de ninguna de las componentes,  $L^{grano} = L^{par}$ .  $L^{par}$  es el tensor gradiente de velocidad de deformación aplicado al par de granos vecinos.
- Tipo I: se permite un corte adicional en la componente  $L_{13}$ .

$$L^{grano 1} = L^{par} + \Delta L_{13}$$

$$L^{grano 2} = L^{par} - \Delta L_{13}$$

- Tipo II: agrega un corte suplementario en el plano ND-TD al propuesto en el Tipo I

$$L^{grano 1} = L^{par} + \Delta L_{13} + \Delta L_{23}$$

$$L^{grano 2} = L^{par} - \Delta L_{13} - \Delta L_{23}$$

- Tipo III: asume una compresión uniforme en la dirección ND, pero cuya relación respecto a las otras dos deformaciones principales no está fijada a priori.

$$L^{grano 1} = L^{par} + \Delta L_{11/22} + \Delta L_{13}$$

$$L^{grano 2} = L^{par} - \Delta L_{11/22} - \Delta L_{13}$$

Dependiendo del esquema de homogeneización y de la interacción a escala mesoscópica se obtiene los diferentes modelos que se analizan en este trabajo (ver Tabla I).

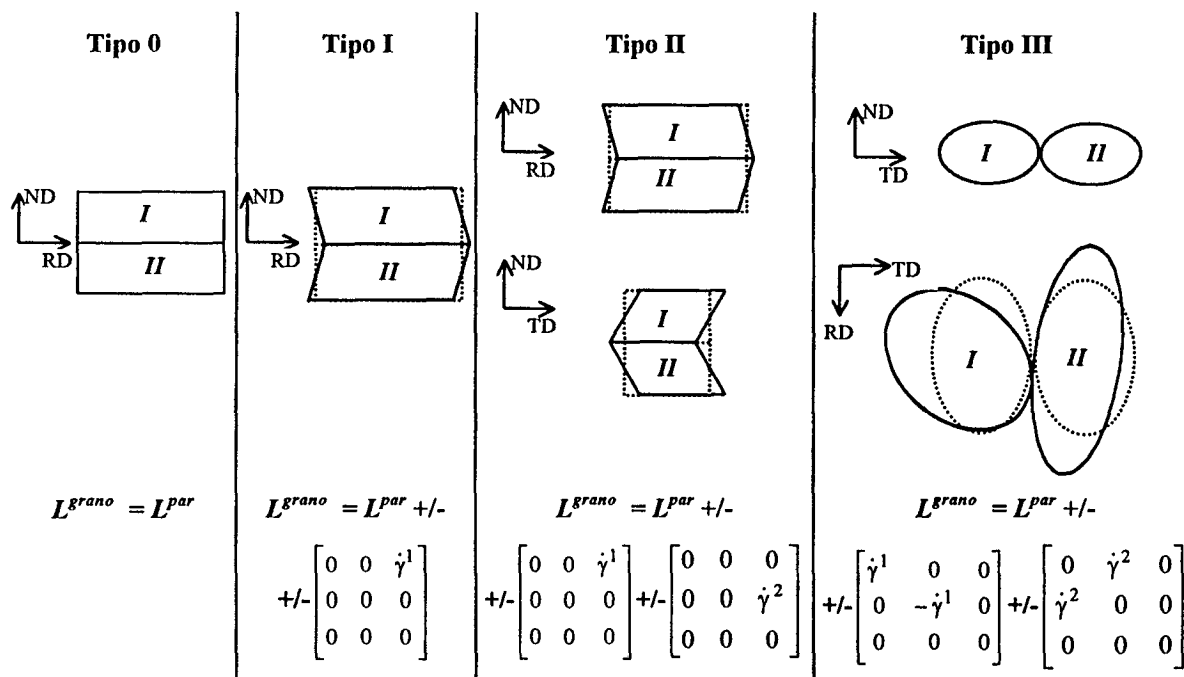


Figura 3: Ilustración de los tres tipos de relajación considerados. Los tensores están definidos en el sistema de referencia de la chapa:  $x$  = dirección laminado (RD),  $y$  = dirección transversal (TD),  $z$  = dirección normal (ND).

Modelo multi-sitio	Esquema de homogeneización	Interacción mesoscópica
FC	FC	-----
SC	SC	-----
LM Tipo I	FC	Tipo I
LM Tipo II	FC	Tipo II
LM Tipo III	FC	Tipo II
SC-RC Tipo I	SC	Tipo I
SC-RC Tipo II	SC	Tipo II
SC-RC Tipo III	SC	Tipo III
SC-FC	SC	Tipo 0

Tabla I: Modelos multi-sitio obtenidos mediante la combinación de distintos esquemas de homogeneización y de interacción mesoscópica.

Cabe destacar que el modelo de lamelas (LM Tipo I, II y III) ha sido inicialmente aplicado al estudio del desarrollo de texturas en procesos de laminado en materiales con simetría cúbica [6,10]. El modelo SC-RC es una extensión del desarrollado por Lebensohn *et al.* [7] sin las restricciones de éste a una morfología particular. Los modelos LM del Tipo I, II y III y los SC-RC Tipo I, II y III tienen restringida su aplicabilidad a procesos de laminado, ya que el tensor de relajación debe ser seleccionado antes del inicio de la simulación. Esta desventaja no está presente en el caso del modelo SC-FC.

### SIMULACIÓN

Se simuló un proceso de laminado de una chapa de Zr a una reducción del 63% en espesor, se supuso un estado de deformación plano. A altas temperaturas, las aleaciones de Zr acomodan la deformación plástica por deslizamiento según 18 sistemas [8]: 3 prismáticos, 3 basales y 12 piramidales (Figura 1). Las simulaciones se

llevaron a cabo con los diferentes modelos presentados en la sección anterior. Para ello se asumió el valor  $n = 7$  como exponente viscoplástico y no se consideró endurecimiento.

A nivel del cristal simple se adoptaron los valores de los diferentes parámetros listados en la Tabla II.

### DISCUSIÓN

En la Figura 4 se presentan tanto la figura de polos basales experimental como las obtenidas por las simulaciones. Aunque la textura predicha varía significativamente según sea el modelo de cálculo empleado, en todos los casos se observa una sobreestimación de la intensidad, atribuible al hecho de que no se tiene en cuenta la existencia de gradientes de deformación en el interior de los granos. El laminado en caliente de una chapa de Zr induce una alineación preferencial de los polos basales en la dirección ND (Figura 4a).

Modos de deformación	Tensión crítica de activación
Pr<a>	$\tau_{pr<a>}$
Ba<a>	$= 1.5 \tau_{pr<a>}$
Py<c+a>	$= 10 \tau_{pr<a>}$
n	7

Tabla II: Parámetros del cristal simple [12].

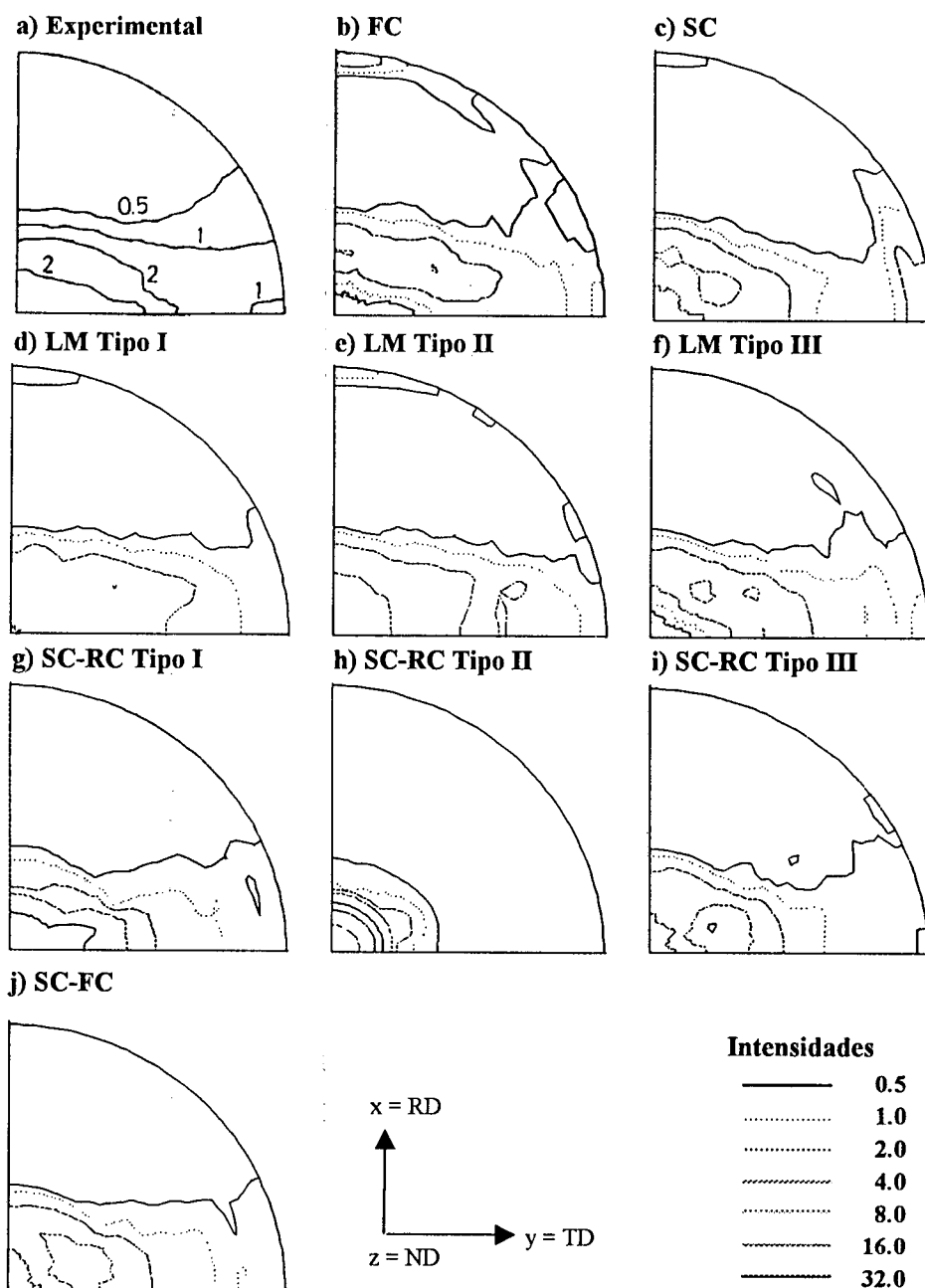


Figura 4: Figuras de polos basales correspondientes a un ensayo de laminado de Zr a alta temperatura a un 63 % de reducción.

La textura obtenida utilizando la hipótesis de deformación homogénea (FC) predice una alta densidad de polos basales cercanos a RD, similares consideraciones pueden realizarse para los casos de los modelo LM Tipo I, LM Tipo II y SC, si bien puede observarse que la intensidad se reduce a la mitad en el primer caso y asume un valor por debajo del nivel *random* en los otros dos. Las figuras de polos restantes, con excepción del caso SC-RC Tipo II que concentra fuertemente los polos basales en la dirección normal, presentan un mejor acuerdo con los resultados experimentales. El modelo SC sobreestima la proporción de granos cuyos polos basales están alineados en la dirección TD, mientras que los casos LM Tipo I y II, SC-RC Tipo I y SC-FC la subestiman ligeramente. Se puede afirmar entonces que el mejor acuerdo se obtiene con los casos LM Tipo III, SC-RC Tipo III y SC-FC.

Cada uno de los modelos predice diferentes actividades relativas de los modos de deformación durante el proceso de laminado. Los valores presentados en la Figura 5 corresponden a la deformación de corte simple  $\gamma$  (deformación acumulada por cada sistema de deslizamiento activado), promediada sobre el conjunto de granos que componen el policristal, y normalizados respecto al modo Pr  $\langle a \rangle$  bajo la hipótesis de homogeneización FC.

Se observa que las variaciones más significativas de la textura están relacionadas con la actividad del modo piramidal, y no dependen significativamente de las pequeñas variaciones de las actividades de los modos

prismático y basal.

La mayor actividad del modo Py  $\langle c+a \rangle$  se presenta en el caso FC como era esperado por tratarse de una formulación de tipo límite superior y se reduce a medida que el modelo tiende a ser más permisivo en la manera de acomodar la deformación. Esta actividad excesiva del modo Py  $\langle c+a \rangle$  en FC es responsable de la alta intensidad de polos basales en la dirección RD. Esta reducción es total en el caso SC, si bien la evidencia experimental muestra la existencia de trazas de deslizamiento del tipo  $\langle c+a \rangle$  [13]. Esto es así debido a la capacidad del modelo SC de anular la contribución de un modo de deformación potencialmente activo si su tensión resuelta crítica (CRSS) es lo suficientemente alta. Sin embargo en FC un modo de deformación con alta CRSS será activo salvo que existan otros modos orientados de manera más favorable y capaces de acomodar la deformación en la misma dirección en que lo hace el modo con más alta CRSS. En todos los casos, la menor actividad piramidal conduce a un mejoramiento relativo de la textura final. Cabe destacar la capacidad del esquema SC y de los modelos SC-RC Tipo I, SC-RC Tipo III y SC-FC de producir texturas similares a las obtenidas por los modelos LM, utilizando una participación significativamente menor de modos de deformación del tipo  $\langle c+a \rangle$ , lo cual está en un mayor acuerdo con la evidencia experimental.

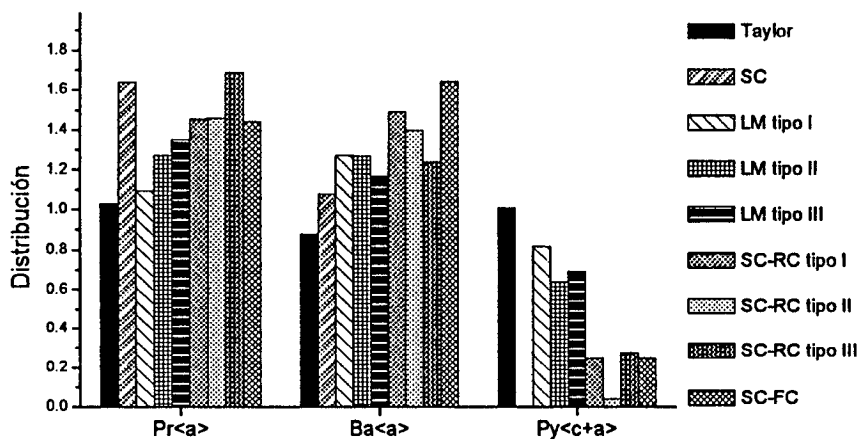


Figura 5: Distribución de la deformación plástica según los diferentes modelos empleados y en función de los modos de deformación potencialmente activos.

Resulta interesante establecer también una comparación entre las heterogeneidades de deformación en el policristal predichas por los diferentes modelos. En la Tabla III se muestran los desvíos estándar del valor absoluto de la diferencia entre las componentes de los tensores de deformación macroscópico  $E_{ij}^{macro}$  y de cada grano  $\epsilon_{ij}^{grano}$ .

En el caso FC, la hipótesis de Taylor determina que los desvíos de las componentes de deformación sean nulos, mientras que los desvíos en el caso SC son todos relativamente altos y diferentes de cero para todas las componentes. Se debe notar que los valores de los desvíos correspondientes a los modelos LM Tipo I, II y III se

anulan excepto aquellos asociados con las componentes a las cuales se les permite relajar, siendo el nivel de heterogeneidad de estas componentes comparable con el modelo SC.

La heterogeneidad en la componente  $E_{11}$  (componente relacionada con la elongación de los granos según RD) es similar en todos los modelos SC, excepto en el caso SC-RC Tipo III, donde la heterogeneidad es mayor. Al permitir elongación heterogénea de los granos individuales hacia RD, el deslizamiento piramidal es evitado y los polos basales se alejan de RD (Figuras 4 c, f, g, h, i, j).

	$E_{11}$	$E_{22}$	$E_{33}$	$E_{23}$	$E_{13}$	$E_{12}$
FC	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SC	0.31	0.23	0.40	0.27	0.18	0.20
LM Tipo I	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.00
LM Tipo II	0.00	0.00	0.00	0.32	0.35	0.00
LM Tipo III	0.32	0.32	0.00	0.00	0.00	0.27
SC-RC Tipo I	0.36	0.22	0.43	0.28	0.38	0.17
SC-RC Tipo II	0.32	0.15	0.37	0.11	0.08	0.15
SC-RC Tipo III	0.43	0.42	0.52	0.32	0.17	0.25
SC-FC	0.35	0.27	0.42	0.29	0.21	0.20

*Tabla III : Análisis estadístico de la heterogeneidad de deformación en el policristal*

De acuerdo al análisis de las figuras de polos basales presentadas en la Figura 4 y a los valores de heterogeneidad de deformación presentados en la Tabla III, los modelos que permiten obtener predicciones más cercanas a los resultados experimentales y consistente con la microestructura observada son los modelos multi-sitio LM Tipo III, SC-RC Tipo III y SC-FC.

## Referencias

- 1 - Taylor G., J.Inst. Metals 62, 307 (1938).
- 2 - Sachs E., Z. Verein, Deutch Ing. 72, 734 (1928).
- 3 - Kocks U., Chandra H., Acta metall. 30, 695 (1982).
- 4 - Lebensohn R., Tomé C., Acta metall. mater. 41, 2611 (1993).
- 5 - Molinari A., Canova G., Ahzi S., Acta metall. 35, 2983 (1987).
- 6 - Van Houtte P., Delannay L., Samajdar I., Textures and Microstructures 31,109 (1999).
- 7 - Lebensohn R. Signorelli J., Uhlenhut H., Proceeding of the 19th Riso International Symposium, 331 (1998).
- 8 - Tenkoff E., Met. Trans. 9A, 1401 (1978).
- 9 - Fundenberger J., Philippe M.J., Wagner F., Esling C., Acta mater. 45, 4041 (1997).
- 10 - Van Houtte P., Mater. Sci. Eng., 55, 69 (1982).
- 11 - Van Houtte P., Delannay L., Kalidindi S., Int. J. Plast. 18, 359 (2002).
- 12 - Lebensohn R. Tesis Doctoral (1993).
- 13 - Lebensohn R., Sánchez P., Pochettino A., Scripta metall. mater. 30, 481 (1994).