

ESTUDIO DE LA SUBESTRUCTURA DE GRANOS INDIVIDUALES EN CHAPAS DE ACERO LAMINADAS MEDIANTE UN MODELO DE ENDURECIMIENTO BASADO EN DENSIDAD DE DISLOCACIONES.

Andrea Fourty, Analía Roatta, Raúl Bolmaro, Javier Signorelli

*Instituto de Física Rosario, (IFIR-CONICET), Universidad Nacional de Rosario
Bv. 27 de Febrero 210b, 2000 Rosario Argentina, <http://www.ifir-conicet.gov.ar>*

Palabras claves: BCC chapa laminada, Textura, Densidad de dislocaciones.

Resumen. La textura final que presentan las chapas de acero de bajo carbono depende tanto de su composición química como de la microestructura que desarrollan. En el presente trabajo se muestran detalles de la implementación numérica de una ley de endurecimiento/ablandamiento siguiendo el trabajo de Peeters et al. (Acta mater. Vol. 48, 2000, pp. 2123). El análisis original, basado en una transición de escala con condiciones totalmente impuestas (límite superior), se extiende al caso de una homogeneización de tipo autoconsistente. La microestructura intragranular se describe en base a mecanismos físicos elementales de creación, acumulación y aniquilación de dislocaciones: densidades de dislocaciones que representan a paredes de celda, paredes de bloques de celda y de polarización. Se estudia la evolución de las diferentes densidades de dislocaciones sobre la fibra γ ($\{111\}\langle 110 \rangle$ a $\{111\}\langle 112 \rangle$ en dirección $\langle 111 \rangle // ND$, ND: dirección normal) característica de materiales BCC laminados en frío. Se encuentra que las dislocaciones de paredes de celda muestran un comportamiento creciente con la deformación, mientras que las dislocaciones de bloques de celda saturan a partir de una deformación del orden de 0.10-0.20 VM.

1 NOTACIÓN

b	vector de Burgers
G	módulo de corte
CB	bordes de celda
CBB	bordes de bloques de celdas
ρ	densidad de dislocaciones inmóviles almacenadas en interior de celdas y CB
ρ_i^{wd}	densidad de dislocaciones inmóviles almacenadas en CBB
ρ_i^{wp}	densidad de dislocaciones móviles direccionales asociadas a CBB
ρ_{sat}	densidad de dislocaciones de saturación inmóviles en interior de celdas y CB
ρ_{sat}^{wd}	densidad de dislocaciones de saturación inmóviles almacenadas en CBB
ρ_{sat}^{wp}	densidad de dislocaciones de saturación móviles direccionales asociadas a CBB
ρ_{baush}	densidad de dislocaciones removilizadas asociadas a cambios en caminos de deformación
α	parámetro de modulación de la interacción
f	fracción de volumen de CBB
τ_s	tensión resuelta crítica en el sistema s
τ^0	contribución a τ_s debida a todos los aspectos microestructurales no tenidos en cuenta explícitamente por el modelo
τ^{CB}	contribución a τ_s de la densidad de dislocaciones CB
τ_{is}^{CBB}	contribución a τ_s de la densidad de dislocaciones en CBB y el efecto del movimiento direccional de las dislocaciones asociadas a CBB
I	coeficiente de inmovilización de dislocaciones CB
I^{wd}	coeficiente de inmovilización de dislocaciones CBB
I^{wp}	coeficiente de inmovilización de dislocaciones asociado con efectos de polaridad
R	coeficiente de recuperación de dislocaciones CB
R^{wd}	coeficiente de recuperación de dislocaciones asociadas a CBB
R^{wp}	coeficiente de recuperación de dislocaciones asociado con efectos de polaridad
\mathbf{u}_1^w	vector unitario normal a la CBB paralela al plano $\{110\}$ más activo
\mathbf{u}_2^w	vector unitario normal a la CBB paralela al plano $\{110\}$ segundo en actividad
Θ_i	flujo neto de dislocaciones proveniente de sistemas no coplanares con los bordes i de celdas de dislocaciones orientados
$\dot{\Gamma}_{new}$	velocidad de corte simple total correspondiente a las dos familias que contienen los sistemas más activos
R_{ncg}	aniquilación latente en CBB
R_{rev}	recuperación de dislocaciones móviles asociado con inversión de flujo neto
R_2	coeficiente de interacción entre dislocaciones removilizadas y CB asociado a efectos de inversión de flujo

2 INTRODUCCIÓN

Los modelos policristalinos de deformación plástica han mostrado ser una herramienta útil para la predicción e investigación de fenómenos que involucran comportamientos anisótropos de materiales metálicos, tales como coeficientes de anisotropía y superficies de fluencia. Frecuentemente, muchas de las aplicaciones realizadas consideran sólo a la textura cristalográfica como la variable principal del problema. Sin embargo, las observaciones

micrográficas muestran claramente que existe una distribución no uniforme de dislocaciones dentro de los granos. Esta heterogeneidad en la distribución de dislocaciones puede clasificarse en función de los diferentes tipos de arreglos de dislocaciones creados: paredes de bloques de celdas de dislocaciones orientados (CBB, *cell-block boundaries*); bordes de celdas de dislocaciones aleatoriamente orientados (CB, *cell boundaries*) y dislocaciones de foresta o isotrópicamente distribuidas (ID, *incidental dislocations*). Con la finalidad de describir este tipo de microestructuras a partir de los mecanismos básicos de creación, almacenamiento y aniquilación de dislocaciones se asocia a cada uno de estos mecanismos una diferente densidad de dislocaciones, la cual es tratada como una variable interna en el modelo.

La ley de comportamiento local se asume de tipo viscoplástica potencial, y sólo se consideran mecanismos de deformación por deslizamiento plástico, sin tener en cuenta mecanismos de maclado o de transformación de fase. Si bien la ley constitutiva es de carácter general y puede ser aplicada, con mayor o menor éxito a una amplia variedad de materiales cristalinos, al incluir una detallada descripción de los fenómenos intragranulares la aplicabilidad del modelo se restringe al dominio de validez de esta última. En el presente caso se focaliza en el estudio de materiales cúbicos centrados en el cuerpo (BCC, *body center cubic*) dado que las ecuaciones que describen la subestructura desarrollada han sido obtenidas en base a observaciones sobre este tipo de red cristalina. En materiales BCC los planos de deslizamiento pertenecen a las familias de planos $\{110\}$, $\{112\}$, incluso $\{123\}$ manteniendo en común la dirección de deslizamiento $\langle 111 \rangle$. A medida que la deformación plástica se desarrolla en el interior del grano se acumulan dislocaciones formando celdas de dislocaciones, las cuales son delimitadas por paredes rectilíneas donde se concentra una importante densidad de dislocaciones. En el interior de la celda, el material presenta además una densidad de dislocaciones distribuidas en forma aleatoria con menor densidad. Las dislocaciones estadísticamente acumuladas en el interior de las celdas y las que forman sus paredes son responsables del endurecimiento isótropo del material, mientras que las que se acumulan formando las paredes de bloques de celdas contribuyen, mayormente, al comportamiento anisótropo.

En el presente trabajo se muestran detalles del modelo de subestructura mencionado previamente, en el marco de un esquema de homogeneización autoconsistente (SC, *self-consistent*). Se muestran la subestructura obtenida para orientaciones individuales: orientación estable (OE), parcialmente estable (OPE) e inestable (OI). La evaluación de las diferentes clases de densidades de dislocaciones se discute para sollicitaciones de corte simple y de laminado ideal. Posteriormente, se analiza la influencia de la estrategia de transición de escalas utilizada (Taylor y SC) en las predicciones obtenidas para un material policristalino frente al mismo tipo de sollicitaciones.

3 MODELO DE MICROESTRUCTURA

En la presente sección se realiza una reseña de la manera en que la subestructura de dislocaciones se incorpora al modelo de microestructura. El desarrollo original puede verse en detalle en los trabajos de B. Peeters et al. (2001, 2002).

La evolución de la estructura de dislocaciones con la deformación se describe en términos de 3 variables internas: ρ , ρ^{wd} y ρ^{wp} . La contribución a ρ proviene de las dislocaciones estadísticamente almacenadas en el interior de las celdas (ID) junto con las correspondientes a bordes de celdas (CB). ρ^{wd} se construye con la acumulación local de dislocaciones inmóviles en las paredes densas (CBB), que representan uno de los mayores obstáculos al libre movimiento del resto de las dislocaciones (endurecimiento latente). ρ^{wp} representa la densidad local de dislocaciones móviles asociadas a las CBB creadas por la interacción de dislocaciones móviles con otras pre-existentes en las CBB o con otras dislocaciones móviles

ya almacenadas en dicha pared (Figura 1). Esta densidad posee una polaridad o signo, pudiendo adoptar valores negativos. Las dislocaciones de cierto signo son detenidas a uno de los lados de la pared y las de signo opuesto al otro. Esta polaridad introduce relativa asimetría en la respuesta del material al deslizamiento.

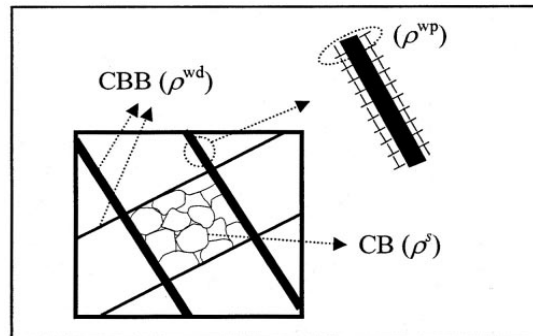


Figura 1: Esquema del modelo de microestructura: CBBs paralelas a los planos $\{110\}$; distribución aleatoria de CBs; representación de la polaridad en las CBBs, (Peeters et al., 2000)

Los muros de dislocaciones se ubican paralelos a los planos $\{110\}$ por lo que, en forma general, no son un obstáculo al deslizamiento sobre los mismos planos. La evolución de las tres densidades de dislocaciones consideradas se formula en base a los sistemas de deslizamiento activos. Las actividades de los sistemas de deslizamiento y de los planos de deslizamiento quedan principalmente determinados por la orientación del cristal respecto a la deformación impuesta y el criterio de acomodación definido en el esquema de homogeneización utilizado.

3.1 CBB

Los bordes bloques de celdas de dislocaciones orientados son formados en el material paralelos a los sistemas de deslizamiento más activos. La evidencia experimental sugiere que las CBB son paralelas a los planos $\{110\}$ (Fernandez and Schmid, 1983). Por otra parte son mayormente responsables del endurecimiento latente entre sistemas; la activación de un nuevo sistema requerirá un incremento en la tensión necesaria originalmente (Franciosi, 1985). Dos familias de CBBs son creadas durante el proceso de deformación: una de ellas paralela al plano en el que se encuentra el sistema de mayor actividad $\{110\}$ y la segunda se corresponde con el plano, también $\{110\}$, en el que se encuentra el siguiente sistema más activo. Los sistemas de deslizamiento que involucran planos $\{112\}$ presentes en estructuras BCC no participan en la construcción de las CBBs. En función de estas observaciones, los sistemas de deslizamiento sobre planos $\{110\}$ se agrupan en seis familias, que pueden definirse como se muestra en la Tabla 1.

Sistema activo	CBB
$[111]$ o $[1\bar{1}\bar{1}]$	(1-10)
$[111]$ o $[1\bar{1}1]$	(10-1)
$[111]$ o $[1\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	(01-1)
$[1\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ o $[1\bar{1}1]$	(110)
$[11\bar{1}]$ o $[11\bar{1}]$	(101)
$[1\bar{1}1]$ o $[11\bar{1}]$	(011)

Tabla 1: Familias de paredes de bloques de celdas de dislocaciones

La densidad de dislocaciones de cada CBB- i puede ser calculada en la forma siguiente:

$$\frac{\dot{\rho}_i^{wd}}{\rho_{sat}^{wd}} = \frac{1}{b} \left(I^{wd} \sqrt{\frac{\rho_i^{wd}}{\rho_{sat}^{wd}}} - R^{wd} \frac{\rho_i^{wd}}{\rho_{sat}^{wd}} \right) \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}^s| \quad i=1,2 \quad (1)$$

$$\frac{\dot{\rho}_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} = \left(\text{sign}(\Theta_i) I^{wp} \sqrt{\frac{\rho_i^{wd} + |\rho_i^{wp}|}{\rho_{sat}^{wp}}} - R^{wp} \frac{\rho_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} \right) |\Theta_i| \quad i=1,2 \quad (2)$$

Si llamamos \mathbf{u}_1^w y \mathbf{u}_2^w a los vectores unitarios normales a ambas familias de CBBs, el flujo neto de dislocaciones de sistemas no coplanares con borde i está dado por:

$$\Theta_i = \sum_{s=1}^n \frac{\dot{\gamma}_s}{b} \mathbf{u}_s^b \cdot \mathbf{u}_i^w \quad (3)$$

3.2 CB

La distribución de los CB tiene un carácter aleatorio, por lo cual su contribución al endurecimiento del material es de tipo isotrópico. La evolución de la densidad de dislocaciones satisface una la ley clásica Kocks-Mecking:

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho_{sat}} = \frac{1}{b} \left(\mathbf{I} \sqrt{\frac{\rho}{\rho_{sat}}} - R \frac{\rho}{\rho_{sat}} \right) \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}^s| \quad (4)$$

La integración de la ecuación (4) permite obtener el valor de saturación de la densidad de dislocaciones correspondiente al estado estacionario de la estructura de celdas.

3.3 Cambio de actividad plástica

Durante un cambio en la actividad plástica (originada por el cambio en la deformación impuesta o por la rotación del grano) las dislocaciones móviles de los sistemas de deslizamiento involucrados tienden gradualmente a formar nuevas CBB compatibles con el modo de deformación actualmente activo, siguiendo el comportamiento descrito en el apartado 3.1. Adicionalmente, se presenta una lenta desintegración de las CBBs formadas previamente de acuerdo a la ley siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\dot{\rho}_i^{wd}}{\rho_{sat}^{wd}} &= -\frac{R_{neg}}{b} \frac{\rho_i^{wd}}{\rho_{sat}^{wd}} \dot{\Gamma}_{new} \\ \frac{\dot{\rho}_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} &= -\frac{R_{neg}}{b} \frac{\rho_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} \dot{\Gamma}_{new} \end{aligned} \quad (5)$$

Si se produce una inversión en los flujos Θ_i , manteniendo los mismos sistemas activos como se observa en los ensayos reversos, se aumentará la aniquilación de las dislocaciones CB. La ecuación (4) se generaliza agregando un término adicional que contempla este efecto.

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho_{sat}} = \frac{1}{b} \left(\left(I \sqrt{\frac{\rho}{\rho_{sat}}} - R \frac{\rho}{\rho_{sat}} \right) \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}^s| - \Psi R_2 \frac{\rho}{\rho_{sat}} \frac{\rho_{bausch}}{2\rho_{sat}^{wp}} \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}^s| \right) \quad (6)$$

El parámetro Ψ tiene en cuenta la inversión de flujos:

$$\begin{aligned} \Psi &= 0 && \text{si no se produce inversión;} \\ \Psi &= 1 \text{ y } \rho_{bausch} = |\rho_i^{wp}| && \text{si el flujo es invertido sólo para la familia } i. \end{aligned}$$

$\Psi = 1$ y $\rho_{bausch} = |\rho_1^{wp}| + |\rho_2^{wp}|$ si el flujo es invertido para ambas familias.

La inversión del flujo Θ_i asociado con una familia de CBB actualmente generada, provoca la aniquilación de la densidad de dislocaciones direccionales móviles acumuladas en las paredes de estas CBB:

$$\frac{\dot{\rho}_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} = -R_{rev} \frac{\rho_i^{wp}}{\rho_{sat}^{wp}} |\Theta_i| \quad (7)$$

3.4 Tensión crítica resuelta

La tensión resuelta crítica en cada sistema de deslizamiento s se asume como la suma de las contribuciones de cada uno de los tipos de subestructura considerados. Si bien la naturaleza del fenómeno es compleja, y siguiendo lo propuesto por Kocks et al. (1975), la simple superposición de efectos ha mostrado ser una aproximación adecuada (ec. (8)).

$$\begin{aligned} \tau_s &= \tau^0 + (1-f) \tau_s^{CB} + f \sum_{i=1}^6 \tau_s^{CBB} = \\ &= \tau^0 + (1-f) \alpha G b \sqrt{\rho} + f \sum_{i=1}^6 \alpha G b \left(\left\langle \sqrt{|\rho_i^{wp}|} \mathbf{u}_s^b \cdot \mathbf{u}_i^w \text{sign}(\rho_i^{wp}) \right\rangle + \sqrt{|\rho_i^{wd}|} \left| \mathbf{u}_s^b \cdot \mathbf{u}_i^w \right| \right) \end{aligned} \quad (8)$$

4 TRANSICIÓN DE ESCALA: MICROSCÓPICA-MESOSCÓPICA

La forma de obtener la respuesta del agregado policristalino a partir del conocimiento de la respuesta de los granos individuales y el modo en la que estos interactúan define el método de transición de escala empleado. La hipótesis de Taylor, asume que todos los granos adoptan el mismo gradiente de velocidad e igual al impuesto macroscópicamente. Constituye un límite superior del comportamiento del material y es la metodología más difundida entre los métodos de homogeneización. La implementación del modelo de microestructura en el ámbito de un modelo policristalino autoconsistente permite, además de acoplar la anisotropía debida a la estructura cristalina del material a la estructura de dislocaciones desarrollada en el grano, tener en cuenta la heterogeneidad en la distribución de la deformación en el agregado, propia de los modelos autoconsistentes.

El agregado policristalino se representa como un conjunto de orientaciones con pesos. La respuesta de cada grano resulta del criterio de localización, en este caso, se basa en una interacción viscoplástica del grano con un medio viscoplástico efectivo equivalente, que a su vez representa al agregado policristalino como un todo homogéneo. El comportamiento global se obtiene por la imposición de homogeneización, que es un promedio, pesado por la fracción de volumen, del comportamiento de todos los granos. La ecuación constitutiva de cada grano está dada por una ley potencial de la forma:

$$\mathbf{d} = \dot{\gamma}_s \sum_{s=1}^n \frac{\mathbf{m}^s \otimes \mathbf{m}^s}{\tau_c^s} \left(\frac{\mathbf{m}^s : \mathbf{s}}{\tau_c^s} \right)^{n-1} : \mathbf{s} \quad (9)$$

donde \mathbf{m}^s , τ_c^s , $\dot{\gamma}_s$ y n , son los parámetros de cada sistema de deslizamiento s : tensor de Schmid, tensión crítica de activación, velocidad de corte de referencia e inversa de la sensibilidad a la velocidad de deformación, respectivamente. El desvío local respecto del estado macroscópico caracteriza la ecuación de interacción:

$$(\mathbf{d} - \bar{\mathbf{d}}) = -\tilde{\mathbf{M}} : (\mathbf{s} - \bar{\mathbf{s}}) \quad (10)$$

donde \mathbf{d} y \mathbf{s} son la velocidad de deformación y tensión del grano, respectivamente; mientras que $\bar{\mathbf{d}}$ y $\bar{\mathbf{s}}$ corresponden a las mismas variables a nivel del agregado policristalino. El tensor de localización $\tilde{\mathbf{M}}$ es una función del módulo viscoplástico del policristal, del tensor de Eshelby \mathbf{S}^{esh} y de la forma y orientación de cada grano:

$$\tilde{\mathbf{M}} = (\mathbf{I} - \mathbf{S}^{esh})^{-1} : \mathbf{S}^{esh} : \mathbf{M}^{tg} \quad (11)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones (9), (10) y (11) en forma iterativa para todos los granos, se calcula la respuesta mecánica de cada una de ellos y la del agregado policristalino. La Figura 2 muestra un esquema de la implementación del modelo de microestructura en el marco del modelo de homogeneización utilizado.

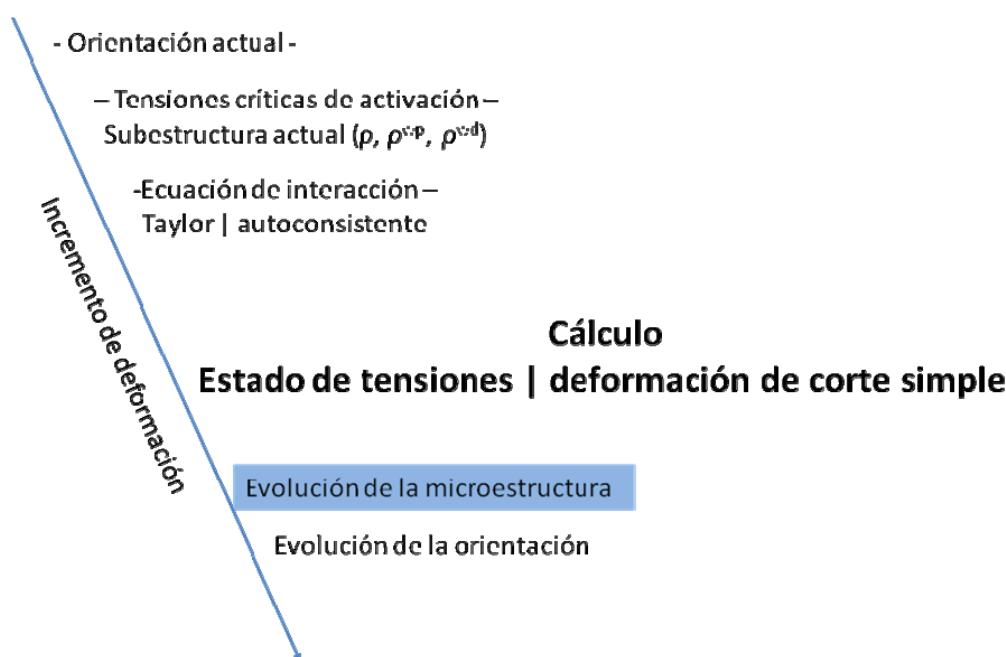


Figura 2: Diagrama de flujo del esquema de cálculo realizado

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

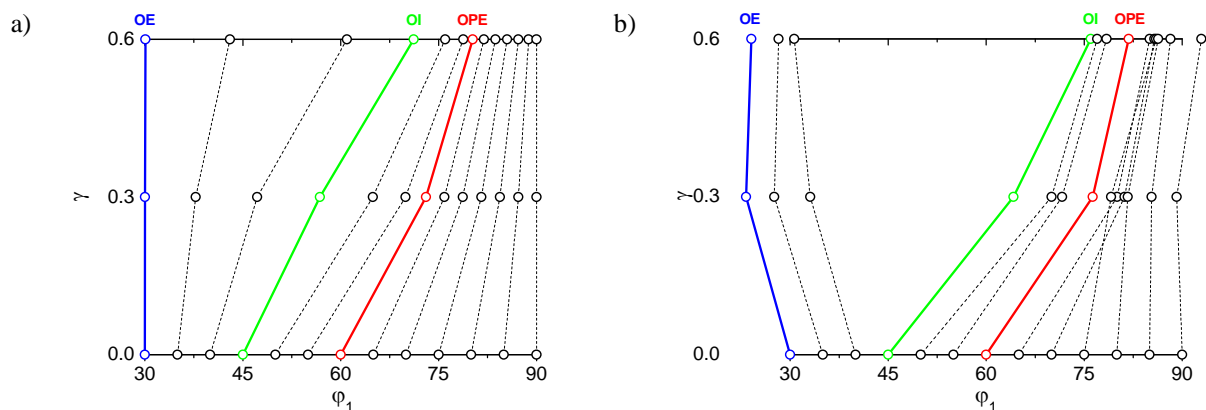
Las simulaciones se realizan imponiendo un gradiente de velocidad de deformación macroscópico constante; la deformación final se alcanza con pasos incrementales iguales a 0.0025. Se adoptan como sistemas de deslizamiento $\{110\} \langle 111 \rangle$ y $\{112\} \langle 111 \rangle$ típicos de los materiales BCC, considerando ambos modos de deformación con igual tensión crítica. Se adopta un valor de sensibilidad a la velocidad de deformación $n=50$. Como textura inicial se asume una distribución de orientaciones acorde a la textura de laminado en caliente (*hot band*) para aceros de bajo carbono. Dicha textura se obtuvo numéricamente considerando un proceso de laminación en fase FCC (*face center cubic*) seguido de una transformación martensítica. La transformación de fase se modelizó asumiendo la existencia de relaciones de orientaciones de tipo Kurdjumov-Sachs y mediante un criterio de selección de variantes jerarquizada por la actividad de los sistemas de deslizamiento (Fourty et al., 2009). La textura resultante se discretiza por medio de un conjunto de 2000 orientaciones con igual peso. Se asume un valor inicial de 1.10^{10} $1/m^2$ para las densidades de dislocaciones consideras, ρ , ρ_i^{wd} y ρ_i^{wp} . La Tabla 2 muestra los valores adoptados para cada uno de los parámetros intervinientes.

b (m)	G (MPa)	α	f	τ^0 (MPa)	ρ_{sat} (1/m ²)	ρ_{sat}^{wd} (1/m ²)	ρ_{sat}^{wp} (1/m ²)	
$2.48 \cdot 10^{-10}$	$8.16 \cdot 10^4$	0.2	0.2	42.0	$6.7 \cdot 10^{14}$	$1.3 \cdot 10^{15}$	$5.8 \cdot 10^{14}$	
I (m)	I^{wd} (m)	I^{wp} (m)	R (m)	R^{wd} (m)	R^{wp} (m)	R_{ncg} (m)	R_{rev} (m)	R_2 (m)
$8.5 \cdot 10^{-10}$	$2.6 \cdot 10^{-8}$	$2.1 \cdot 10^{-9}$	$8.5 \cdot 10^{-10}$	$2.6 \cdot 10^{-8}$	$3.8 \cdot 10^{-9}$	$2.3 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-8}$

Tabla 2: Parámetros microestructurales utilizados en la simulación

5.1 Comportamiento microscópico

En una primera etapa se estudia la estabilidad y la evolución de las distintas densidades de dislocaciones en orientaciones testigos ubicadas inicialmente sobre la fibra γ , dada la importancia de este tipo de orientaciones en proceso de laminado y estampado en general. Utilizando ángulos de Euler (φ_1 , Φ , φ_2 , en convención de Bunge), los granos sobre la fibra γ tienen coordenadas (φ_1 , 55° , 45°). En la Figura 3 se muestra la evolución de φ_1 bajo deformaciones de corte de 0.30 y 0.60 bajo los dos esquemas de homogeneización estudiados. En el caso SC es importante remarcar, que si bien se analizan orientaciones individuales, el resto de las orientaciones que conforman el medio efectivo equivalente afecta la forma que cada una de éstas acomoda la deformación impuesta externamente en contraposición con el criterio de Taylor. Puede verse que en ambos casos se predice una concentración de orientaciones alrededor de la componente $\{111\}\langle 112\rangle$, la cual se intensifica con el aumento de la deformación. En base a lo anterior podemos clasificar tres tipos de granos: orientación estable (OE) (30° , 55° , 45°); orientación inestable (OI) (45° , 55° , 45°) y orientación parcialmente estable (OPE) (60° , 55° , 45°). El cambio en las coordenadas Φ y φ_2 es mínimo en el caso de Taylor mientras que presenta una dispersión no mayor a 10° para el caso SC, lo cual justifica el análisis sólo sobre la variación de φ_1 . La Figura 3b muestra que en el caso SC la evolución de la reorientación es mucho más rápida que bajo el esquema de Taylor, concentrando las orientaciones alrededor de la componente estable (30° , 55° , 45°) y de su análoga (90° , 55° , 45°). Se observan claramente dos velocidades de cambio en las orientaciones, la mayor reorientación se produce en la primera mitad de la deformación impuesta, mientras que en la segunda mitad la reorientación continúa pero mucho más lentamente. Asimismo, debe notarse también que aún las componentes que hemos llamado estables cambian su orientación con el corte impuesto al utilizarse el esquema SC, contrariamente a lo que sucede cuando se emplea la hipótesis de Taylor mostrando el efecto del medio equivalente sobre el comportamiento local.

Figura 3: Evolución de φ_1 para granos sometidos a deformaciones de corte a) Taylor, b) SC

En la Figura 4 se muestra la evolución de las distintas densidades de dislocaciones para los tres granos antes mencionados en el caso de aplicar homogeneización de Taylor. La evolución de ρ es prácticamente idéntica en los tres granos, tanto cualitativa como cuantitativamente. En cambio, al analizar la evolución de ρ^{wd} se observan diferencias significativas: mientras que en el grano estable se desarrollan CBB en un solo plano de deslizamiento durante todo el proceso de deformación, en el grano inestable comienzan a desarrollarse simultáneamente dos paredes de bloques de celdas. En este último a un corte de 0.4, el grano se ha reorientado lo suficiente y comienza a construirse una nueva familia de CBB y a destruirse la que queda desfavorablemente orientada. El grano parcialmente estable presenta un comportamiento intermedio entre los anteriores: al inicio del proceso se construye sólo una pared densa de dislocaciones, y al acumular un corte de 0.1 se construye una segunda pared sobre otro plano de deslizamiento.

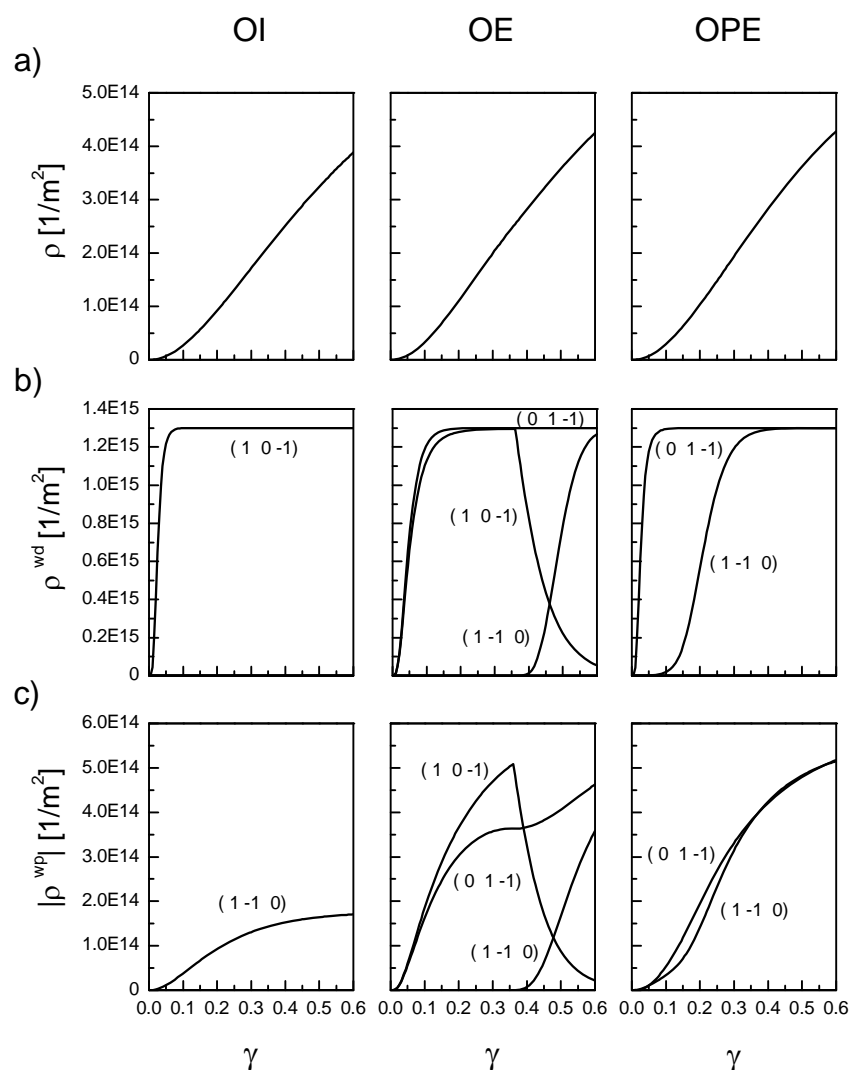


Figura 4: Evolución de ρ , ρ^{wd} y ρ^{wp} en las orientaciones OE, OI y OPE en función del corte aplicado

La evolución de ρ^{wp} también depende fuertemente de la orientación inicial del grano. Se observa que para el grano estable la curva es única y suave, mientras que es doble y de pendiente más pronunciada para el grano parcialmente estable. El grano inestable muestra construcción y destrucción de las densidades de dislocaciones de polarización a medida que evoluciona la deformación.

La Figura 5 muestra un análisis análogo, sobre los resultados obtenidos con el esquema de homogeneización autoconsistente. Si bien a grandes rasgos el comportamiento de la evolución de las diferentes densidades de dislocaciones es similar a lo observado en la Figura 4, se distinguen algunas diferencias. La componente isotrópica varía según sea la orientación inicial que se considere, mostrando una mayor densidad para la orientación estable que para los otros dos casos, en acuerdo con la forma de acomodar la deformación impuesta. En cuanto a la evolución de las CBB en el caso OE se observa la activación de una segunda familia a partir de un corte de 0.4, debido a la ligera reorientación del grano. La orientación menos estable, OI, muestra un comienzo donde se activan las mismas familias de CBB, pero debido a la rápida reorientación predicha por el modelo SC, el desarrollo de una de ellas se frena bruscamente; el proceso de aniquilación hace que sea borrada completamente al cabo de un corte de 0.6. El comportamiento de OPE es prácticamente similar para ambos modelos.

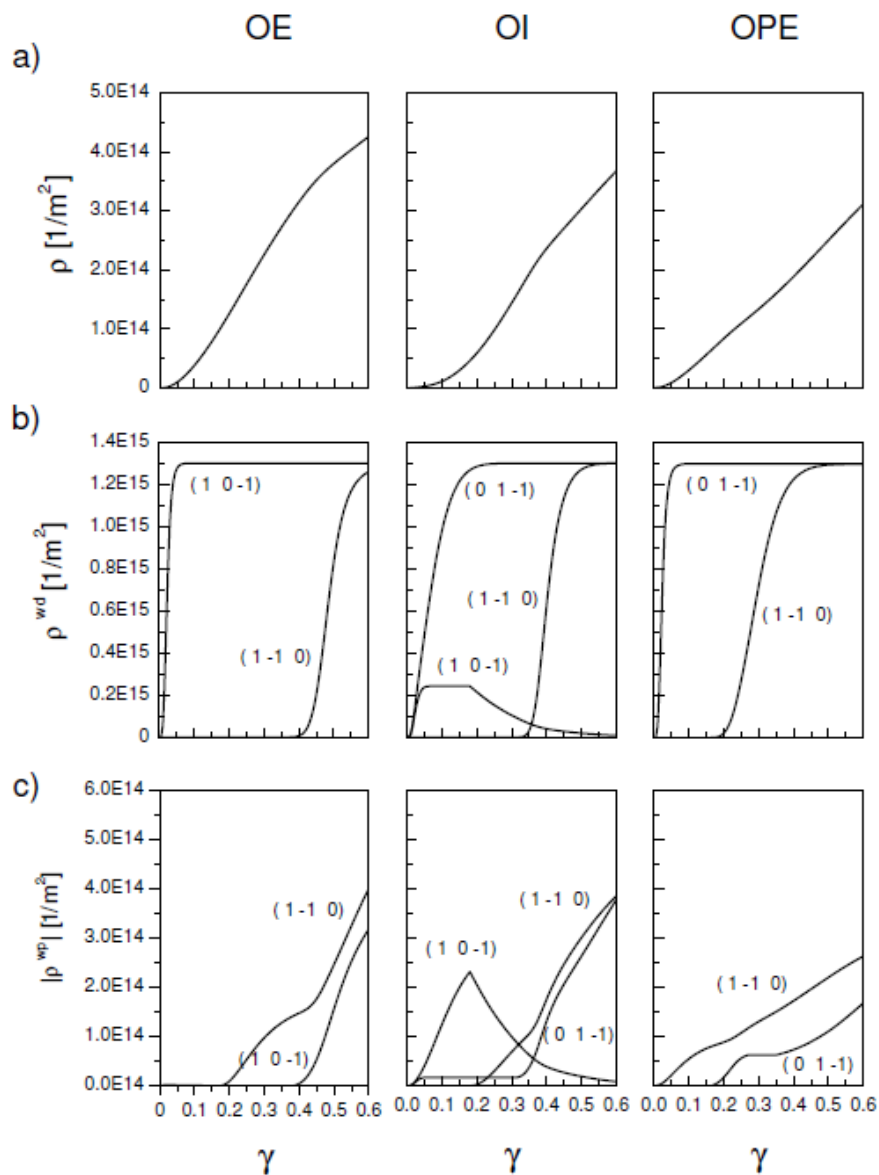


Figura 5: Evolución de ρ , ρ^{wd} y ρ^{wp} en las orientaciones OE, OI y OPE en función del corte aplicado bajo un esquema SC

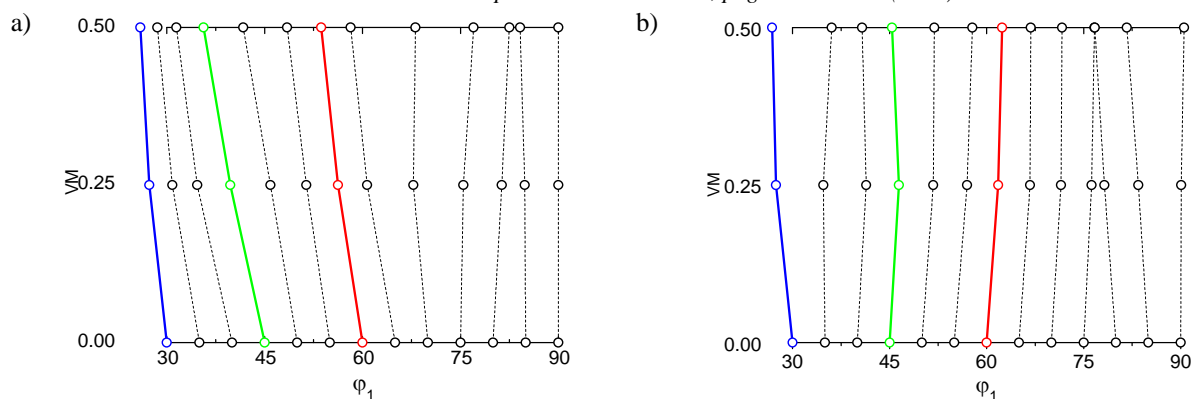


Figura 6: Evolución de ϕ_1 para granos sometidos a deformaciones de laminado de $vM=0.25$ y $vM=0.50$ bajo hipótesis de homogeneización de: a) Taylor y b) SC

Si se analiza la evolución de las mismas componentes testigo sobre la fibra γ en un ensayo de laminado. Se observa que el cambio en ϕ_1 es mínimo, lo que pone en evidencia la estabilidad de estas orientaciones (Figura 6). A diferencia de lo mostrado anteriormente para el ensayo de corte, en el caso de laminado no se observan variaciones cualitativas importantes respecto del método de homogeneización empleado. Cuantitativamente, la evolución de ρ^{wd} muestra una dependencia con la orientación del grano y con el modelo de homogeneización en cuando a la deformación necesaria para la activación de una segunda familia de CBB (Figura 7). En los granos analizados se observa que el borde de bloque de celdas se construye sobre el plano (101), sumándose otro bloque sobre el plano (110) para los granos OI y OPE.

5.2 Comportamiento macroscópico

La Figura 8 muestra la textura inicial y su desarrollo hasta una deformación de von Mises de 0.25 y 0.50 en laminado. En trabajos anteriores (Roatta et al., 2009) se ha verificado, que la construcción a la fibra γ se realiza sólo a partir de orientaciones presentes sobre la misma en la textura inicial, tanto para el caso de Taylor como el SC. Debido a las características de la textura de partida, respecto a la estabilidad de sus componentes, el proceso de laminado no genera nuevas componentes, sino que intensifica las existentes. En el caso de Taylor solamente se concentran dichas orientaciones, mientras que se produce una distribución de intensidades sobre la fibra γ en el caso SC. La fibra γ , horizontal y de intensidad uniforme predicha por el modelo SC está en acuerdo con las texturas experimentales recopiladas en la literatura en aceros de bajo carbono (Ray et al., 1994).

El efecto de la microestructura incorporada en el modelo se analiza macroscópicamente observando la distribución de las densidades de dislocaciones ρ y ρ^{wd} en función de la orientación. Se representa en la sección $\phi_2=45^\circ$ la intensidad de cada tipo de densidad de dislocaciones sobre una grilla de orientaciones de $5^\circ \times 5^\circ \times 5^\circ$ en el espacio de Euler. A cada elemento de la grilla se le asigna una intensidad igual a la suma de las densidades de dislocaciones pertenecientes a ese entorno de orientaciones multiplicadas por su correspondiente fracción de volumen respecto del peso total de orientaciones en el elemento. Se logra de este modo independizarse de la textura del material. En el caso de ρ^{wd} se acumulan en un solo valor las densidades sobre los 6 planos $\{110\}$ de deslizamiento.

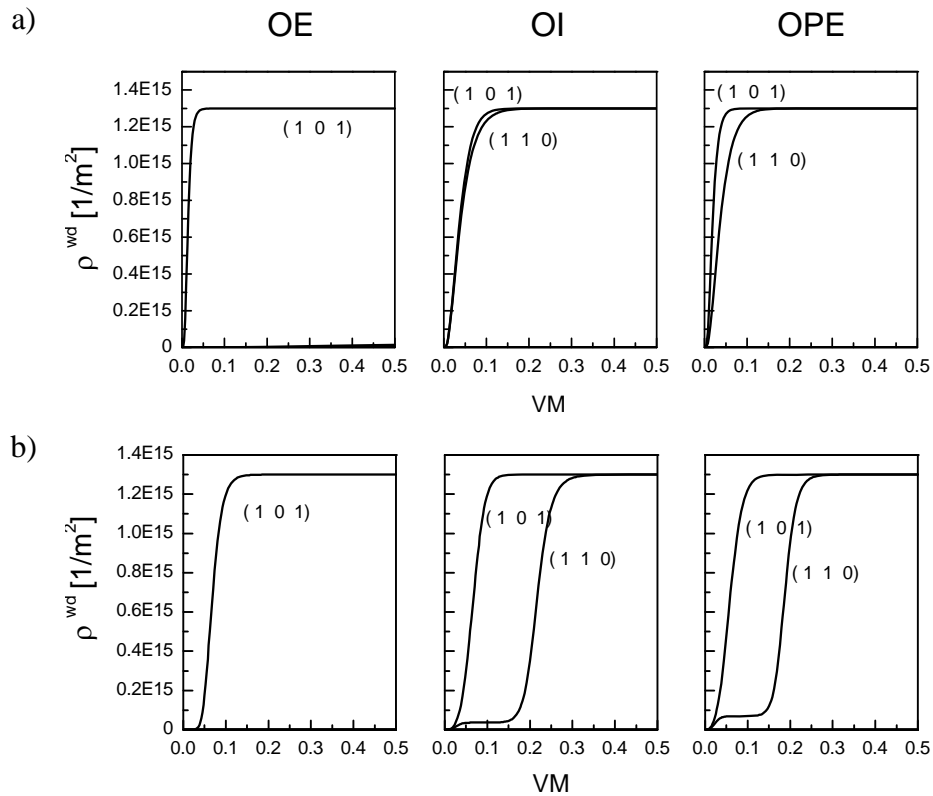


Figura 7: Evolución de ρ^{wd} en las orientaciones OE, OI y OPE en función de la deformación aplicada en laminado. a) Taylor y b) SC

Textura inicial: “hot band”

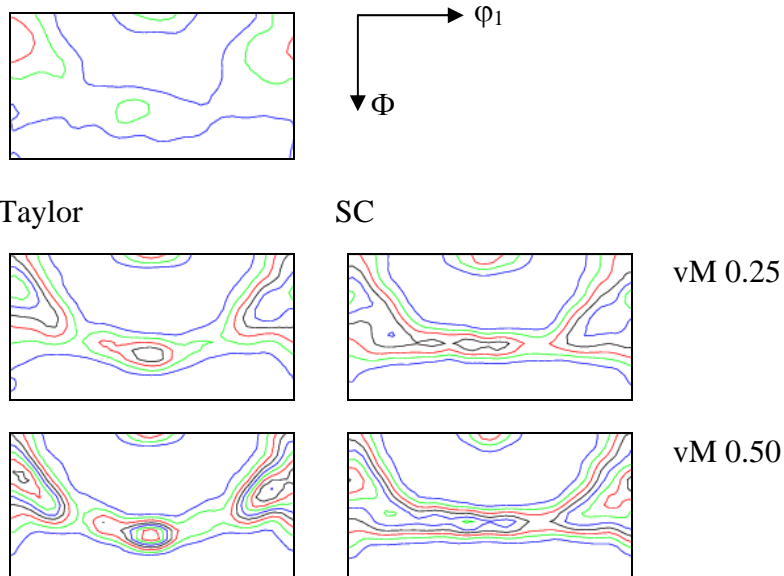


Figura 8: Texturas de laminado en secciones $\phi_2=45^\circ$. Inicial y deformadas a vM 0.25 y vM 0.50. Las líneas de nivel se corresponden con múltiplos de la distribución aleatoria (x RND).

La Figura 9 muestra los resultados obtenidos mediante los modelos de Taylor y SC y su evolución con la deformación. Puede observarse que la densidad ρ aumenta con la

deformación manteniendo el perfil de la distribución, mientras que ρ^{wd} alcanza a $vM=0.25$ su valor de saturación en la mayoría de las orientaciones. Es importante notar que, si bien alrededor de la orientación (110)[1-10] (esquina inferior izquierda) se encuentra la máxima intensidad de ρ , ésta corresponde a granos no representativos de la textura del material. Salvo esta particularidad, se observa que los mayores valores de ρ se hallan en la zona cercana a la fibra γ . El caso SC muestra un desarrollo de ρ y ρ^{wd} con la deformación más lento que en el caso anterior sin llegar a saturar aún a $vM=0.5$. La distribución de densidad de dislocaciones aleatorias es notablemente diferente al caso anterior presentando máximos valores sobre la fibra α alrededor de la componente (114)[1-10] y un valor mínimo uniforme sobre toda la fibra γ . A deformaciones de $vM=0.25$, ρ^{wd} concentra su máximo sólo alrededor de (114)[1-10] y a $vM=0.5$ se agrega un máximo en la componente (111)[0-11] perteneciente a la fibra γ . La heterogeneidad en la deformación de los granos cristalinos permitida mediante el esquema SC es responsable de la mayor anisotropía en el comportamiento global del material.

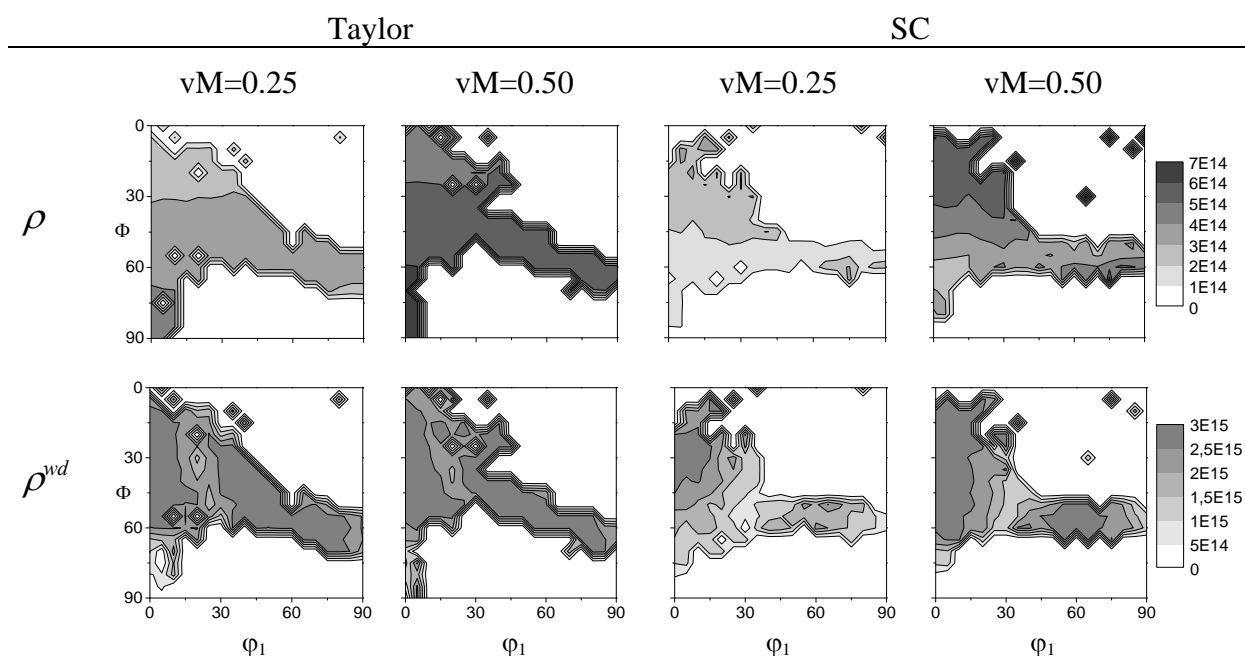


Figura 9: Distribución de densidades ρ y ρ^{wd} en función del modelo empleado durante un laminado a vM 0.25 y vM 0.50

6 CONCLUSIONES

En el desarrollo del presente trabajo se implementó un modelo de endurecimiento-ablandamiento para metales de estructura BCC que contempla el desarrollo de microestructura en término de generación y aniquilación de dislocaciones asociadas a bordes de celdas y bordes de bloques de celdas, de acuerdo al modelo propuesto por Peeters et al.

Se analizó la respuesta de un acero de bajo contenido de carbono con textura inicial tipo "hot band" frente a ensayos simples, corte y laminado, comparando los resultados obtenidos dentro de los esquemas de homogeneización de Taylor y autoconsistente. Se observó que la textura global obtenida para el material depende principalmente del tipo de homogeneización empleado. Se correlacionó la estabilidad de orientaciones cristalinas, en particular la fibra γ , con el desarrollo de densidades de dislocaciones vinculadas con bordes de celda y bordes de

bloques de celdas, notándose la activación de nuevas paredes de bloques de celda en concordancia con una mayor reorientación.

Se prevé aplicar este modelo para describir la anisotropía del material por medio del coeficiente de Lankford con el objeto de discriminar la influencia relativa de la microestructura y la textura desarrollada. La disponibilidad de variables microestructurales que discriminen las orientaciones de los granos abre la posibilidad de comprender fenómenos comandados por energías acumuladas tales como recocido y recristalización.

7 REFERENCIAS

- Delannay L., Melchior M.A., Signorelli J.W., Remacle J.-F., Kuwabara T., *Influence of grain shape on the planar anisotropy of rolled steel sheets – evaluation of three models*, Computational Materials Science 45 (2009), 739–743
- Fernandez J.V. and Schmid J.H., *Dislocation microstructures in steel during deep drawing*, Philos. Mag. A 48 (6), (1983), 841-870
- Fourty, A. L.; Roatta, A.; Bolmaro, R. E.; *Influencia de modelos micromecánicos y leyes de endurecimiento en la predicción de la fibra γ en aceros de bajo carbono*, Anales de Congreso SAM/CONAMET 2009, (2009), en prensa
- Franciosi P., *The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals*, Acta Metall. 33 (9), (1985), 1601-1612
- Kocks U.F., Argon A.S. y Ashby M.F., *Thermodynamics and Kinetics of Slip*, Progress in Materials Science, 19, 303, (1975), 81-115.
- Peeters B., Seefeldt M., Kalidindi K., Houtte P.V. and Aernoudt E., *The incorporation of dislocation sheets into a model for plastic deformation of b.c.c polycrystals and its influence on r-values*, Materials Science and Engineering A 319-321, (2000), 188-191
- Peeters B., Houtte P.V. Kalidindi K., and Aernoudt E., *Crystal plasticity based work-hardening/softening model for b.c.c. metals under changing strain paths*, Acta mater. 48, (2000), 2123-2133
- Peeters B., Seefeldt M., Teodosiu C., Kalidindi K., Houtte P.V. and Aernoudt E., *Work hardening/softening behavior of B.C.C. polycrystals during changing strain paths: I. An integrated model based on substructure and texture evolution, and its prediction of the stress-strain behavior of an IF steel during two-stage strain paths*, Acta Mater., 49 (2001), 1607-1619.
- Peeters B., Kalidindi S., Teodosiu C., Houtte P.V. and Aernoudt E., *A theoretical investigation of the influence of dislocation sheets on evolution of yield surfaces in single-phase B.C.C. polycrystals*, J. of the Mech. And Phys. of Solid, 50 (2002), 783-807
- Ray, R.K., Jonas, J.J. and Hook, R.E. *Cold rolling and annealing textures in low carbon and extra low carbon steel*, International Materials Reviews, vol. 39, no. 4 (1994), pp. 129-172
- Roatta, A.; Fourty, A. L.; Bolmaro, R. E.; *A primer on whole through processing simulation understanding of deformation and annealing textures in low carbon steels*, Z. Kristallogr. Suppl. 30 (2009) 111-116 / DOI 10.1524/zksu.2009.