

ESTUDIO DE LA HETEROGENEIDAD A NIVEL GRANULAR EN METALES POLICRISTALINOS A PARTIR DE LA INHOMOGENEIDAD ORIENTACIONAL OBTENIDA POR DIFRACCIÓN DE ELECTRONES RETRODIFUNDIDOS (OIM-EBSD) Y MODELIZACIÓN MICROMECAÁNICA DE CAMPO COMPLETO (FFT)

Código: ING317

Período: 2010-2013

Director: Signorelli, Javier W

E-mail: signorelli@ifir-conicet.gov.ar

Integrantes: Bolmaro, Raul; Manzoco, Dante; De Vincentis, Natalia S

Objetivos

Objetivos generales:

-Profundizar una línea de trabajo dirigida a entender los mecanismos fundamentales de la deformación plástica en materiales policristalinos, focalizando el estudio en modelización de la evolución de la microestructura subgranular.

-Se pretende contribuir en el modelado micromecánico de materiales acoplando fuertemente técnicas numéricas con técnicas experimentales. Se pretende entender mejor la relación existente entre la evolución de las orientaciones cristalográficas al interior del grano (fragmentación) y la posterior localización de la deformación. En este sentido la reciente disponibilidad en nuestro ámbito de un equipo de EBSD, el cual permite acceder a mapas de orientaciones completos del material, y conjuntamente con la técnica de la transformada rápida de Fourier (FFT) para obtener la respuesta del RVE constituyen dos herramientas ideales para alcanzar tal objetivo.

-Contribuir a la formación de recursos humanos calificados en el área del modelado de materiales (Ciencia de Materiales y Mecánica Computacional) por medio de la ejecución de trabajos finales tanto de Licenciatura Física como en Ingeniería Mecánica y tesis de doctorado en la temática del proyecto.

Objetivos específicos:

-Proponer e implementar criterios de reconstrucción del 3D-RVE a partir de los datos superficiales de microscopía SEM-EBSD con el objetivo de representar lo más fielmente posible la microestructura del material.

-Proponer e implementar criterios locales para la actualización de la morfología, utilizando la técnica de conocida como "level set representation". Bajo esta aproximación los bordes de grano están localizados implícitamente utilizando estas funciones "level set". En el caso de policristales una función "level set" es asignada a cada grano, si el elemento de la grilla de Fourier más próximo al borde de grano está en el interior esta función se considera positiva y negativa caso contrario. El contorno cero de esta función define el borde grano y su gradiente la normal al borde de grano. Una adecuada actualización de la topología en el modelo es indispensable para tratar problemas que involucren deformaciones intermedias y grandes.

-Establecer la influencia de las interacciones intergranulares, gradientes de orientaciones intragranulares, tamaño de grano, orientación cristalográfica, etc. en la localización de la deformación y eventual nucleación de fisuras. Aplicación a chapas de aluminio y aceros de bajo carbono bajo cargas biaxiales de tensión no balanceadas.

Resumen Técnico

El objetivo del presente estudio es lograr un mejor entendimiento de la influencia de la microestructura en el comportamiento mecánico de metales policristalinos a través de la simulación numérica y técnicas de microscopía. En orden a alcanzar este objetivo se propone el uso de modelos basados en microplasticidad y mapas de orientaciones obtenidos por microscopía. La respuesta del agregado policristalino o volumen representativo (RVE) se obtiene utilizando la formulación de campo completo basada en la transformada rápida de Fourier (FFT) bajo un régimen de deformación viscoplástico. La obtención del mapa topológico completo de

Las orientaciones cristalográficas a través de la técnica de electrones retrodifundidos (EBSD) permite reconstruir numéricamente la microestructura del material y utilizarla directamente como entrada del modelo de cálculo.

La distribución de orientaciones de cada grano se caracteriza por su orientación promedio, su dispersión y su anisotropía. Se analiza su dependencia con el tamaño de grano y su orientación relativa frente a ensayos mecánicos simples. La dispersión o gradiente de orientaciones cristalinas al interior del grano se caracteriza a través de un tensor de segundo orden de desorientaciones. El cálculo de la curvatura local de la red permite obtener las componentes del tensor de densidad de dislocaciones, lo cual a su vez se utiliza para validar y realimentar al modelo de microestructura propuesto, permitiendo identificar los parámetros de la ley constitutiva del material. La técnica de FFT ha mostrado ser una muy eficiente alternativa frente a las simulaciones micromecánicas por métodos de elementos finitos, disminuyendo el tiempo de cálculo de $N \times N$ a $N \log(N)$ (N representa en número de puntos utilizados en la discretización). Si bien, esta técnica requiere la identificación de un volumen representativo y de condiciones de borde periódicas, su aplicación no es una limitación para el estudio del desarrollo de microestructura a escala mesoscópica. La reconstrucción de la microestructura a partir de los datos superficiales de EBSD se realizan utilizando Teselación de Voronoi. La geometría obtenida satisface la topología granular 2D observada experimentalmente. Se asume que la distribución de granos y orientaciones al interior del RVE es similar a la de los granos superficiales.

Los materiales de estudio son aleaciones de Cu (interés académico) y aleaciones de aluminio y aceros de bajo carbono. Se focaliza en aspectos ligados a la formabilidad de estas aleaciones y su relación con la microestructura desarrollada, particularmente en la relación existente entre fragmentación y localización de la deformación. Asimismo, los resultados obtenidos pueden ser utilizados para la validación de diferentes técnicas de transición de escalas de modelos de homogeneización de 1-sitio. Finalmente se propone realizar un primer análisis de la factibilidad de tratar bajo este esquema la nucleación y propagación incipiente de fisuras a nivel granular.

Disciplina: Ingeniería

Especialidad: Materiales

Palabras Clave: FFT - OIM-EBSD - plasticidad - micromecánica – formabilidad