



**UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA**

SEDE MEDELLÍN

**MICROESTRUCTURAS POLIGONALES BAJO CONDICIONES DE
DEFORMACIÓN ELÁSTICA NO-LINEAL**

JUAN DAVID OSPINA CORREA

Ing., Materiales

MSc Materiales y Procesos

**FACULTAD DE MINAS
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
MEDELLÍN**

2019

**MICROESTRUCTURAS POLIGONALES BAJO CONDICIONES DE
DEFORMACIÓN ELÁSTICA NO-LINEAL**

JUAN DAVID OSPINA CORREA

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
DOCTOR EN INGENIERÍA, CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE MATERIALES

Director:
Dr., Alejandro Toro

Co-Director:
Dr., Juan Pablo Hernández-Ortíz

Línea de Investigación:
**MODELAMIENTO MULTI-ESCALA DE SISTEMAS COMPLEJOS
GRUPO DE TRIBOLOGÍA Y SUPERFICIES**



**FACULTAD DE MINAS
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
MEDELLÍN
2019**

Con especial cariño; Emperador, porque todo mal momento pasa ...

"... Cuando el más apartado rincón del globo haya sido técnicamente conquistado y económicamente explotado; cuando un suceso cualquiera sea rápidamente accesible en un lugar cualquiera y en un tiempo cualquiera; cuando se puedan experimentar, simultáneamente, el atentado a un rey en Francia y un concierto sinfónico en Tokio; cuando el tiempo sólo sea rapidez, instantaneidad y simultaneidad, mientras que lo temporal, entendido como acontecer histórico, haya desaparecido de la existencia de todos los pueblos, entonces, justamente entonces, volverán a atravesar todo este aquelarre como fantasmas las preguntas: para qué?, hacia dónde?, y después qué? ..."

"... When the farthest corner of the globe has been conquered technologically and can be exploited economically; when any incident you like, in any place you like, at any time you like, becomes accessible as fast as you like; when you can simultaneously experience an assassination attempt against a king in France and a symphony concert in Tokyo; when time is nothing but speed, instantaneity, and simultaneity, and time as history has vanished from all Being of all peoples; when a boxer counts as the great man of a people; when the tallies of millions at mass meetings are a triumph; then, yes then, there still looms like a specter over all this uproar the question: what for?, where to? and what then? ..."

Martin Heidegger
Introduction to Metaphysics

Agradecimientos

El tiempo que he invertido en la Facultad de Minas, durante estos últimos años ha sido muy importante y especial para mí, sobre todo por la gente que he conocido y que, de una manera u otra, ha influenciado mi proceso de formación. Esto ha contribuido a que estos años se conviertan en algo verdaderamente especial e inolvidable. Estoy muy agradecido por la asesoría, el buen ánimo, el trato siempre respetuoso y por la paciencia de mis directores, los Profesores *Alejandro Toro* y *Juan Pablo Hernández*, por su soporte continuo, cuidadoso y comprensivo durante este trabajo, incluso si, como ocasionalmente ocurrió, no estaban de acuerdo con el desarrollo de algunos aspectos. He sido muy afortunado de trabajar al lado de grandes académicos en los últimos años; las valiosas contribuciones del Dr., *Abelardo Ramírez-Hernández* y sus ideas, junto con su hospitalidad en el Instituto de Ingeniería Molecular de la Universidad de Chicago (II-USA), el Dr., *Alejandro Márquez* (UnalMed) y sus valiosos consejos durante los primeros años, El Dr., *John Jairo Zuluaga* (UdeA) y el Dr., *Hernán Álvarez* (UnalMed) para el desarrollo de mi investigación y la comprensión del problema han sido invaluable. Además, quiero agradecer el entusiasmo y las valiosas sugerencias del comité de disertación Doctoral. Por otro lado, un agradecimiento muy especialmente a mi mamá, mi esposa, mis tíos, a mis amigos; a toda mi familia, ellos me ayudaron a llegar hasta este punto. Me enseñaron con su confianza y apoyo a creer que puedo lograr cualquier cosa. De esta manera, me ayudaron a encontrar las cosas que valen la pena en la vida. Finalmente, quiero agradecer el apoyo y manifestar mi gratitud y admiración a *Alejo Olaya*, quien ayudó a que este trabajo fuera posible. Hay un grupo de personas muy especiales en la U y que participaron de manera directa en mi proceso académico, colaborando con ideas y conocimiento. Estoy profundamente agradecido con todos ellos (*Caliche, Pachanga, Emperador, Ivan, Jhonatan*) y en general a todo el Grupo de Tribología y Superficies. Adicionalmente, quiero agradecer a la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma Latinoamericana por permitirme el espacio para el desarrollo de las etapas finales de este trabajo. Al Decano, a la Vicerrectoría de Investigación y a todos aquellos que motivaron que este trabajo llegara a su fin. Mención especial a Nayibe, gracias por creer. El trabajo presentado acá fue financiado por la asociación entre la Universidad Nacional de Colombia, sede Medellín, Empresas Públicas de Medellín, Central La Sierra, con el proyecto: *”Pro-TBC: Protección y recuperación de componentes de la ruta de gases calientes de turbinas a gas clase F mediante aplicación de revestimientos de barrera térmica - TBC”* y COLCIENCIAS a través del programa de becas para la formación doctoral; así como a través de la convocatoria 2017-2, Fondo Sapiencia Posgrados Internacionales - Enlaza Mundos, Resolución 6880 de septiembre de 2017 para el viaje a Chicago.

Juan D. Ospina-Correa

Medellín, 2019

MICROESTRUCTURAS POLIGONALES BAJO CONDICIONES DE DEFORMACIÓN ELÁSTICA NO LINEAL

Juan D. Ospina-Correa

EL desarrollo de cierto grado de control sobre las propiedades mecánicas de materiales con microestructuras poligonales, en el contexto de metalurgia física o geología física, es uno de los principales desafíos en la ingeniería moderna, ya que implica la capacidad de diseñar, comprender y modificar características microestructurales específicas del agregado. Convencionalmente, los principales mecanismos responsables por la conducta descrita por los modelos de Read-Shockley son poco conocidos y solo pocas investigaciones sistemáticas, sobre las movilidades de límite de grano, proporcionan pistas sobre las interacciones fundamentales que permiten capturar todas las características del conjunto. Mecanismos como la migración de límites, la movilidad de límites de grano y las rotaciones de grano, las cuales podrían conducir a la coalescencia de los dominios vecinos mediante la eliminación del límite común entre ellos, deben ser considerados para una descripción más detallada del agregado. Estos mecanismos pueden superimponerse de maneras complejas por lo que la estructura de los modelos convencionales generalmente se deduce del ajuste con datos experimentales. En este sentido, desarrollamos y parametrizamos un funcional fenomenológico de energía libre, informado teóricamente, que permite reproducir la microestructura de materiales poligonales, así como la implementación de una estrategia para el proceso de solución vía minimización energética a través de simulación Monte Carlo, lo que nos permite reproducir las características topológicas que se observan comúnmente en estos agregados, pero además, nos permitió controlar el tamaño medio y su distribución, habilitándonos como simulador para el diseño y control del sistema. Para lograr los objetivos, empezamos por implementar una extensión 2D del modelo Q -state Potts modificado, reproduciendo los resultados ya establecidos, pero adicionalmente incluimos penalizaciones energéticas mediante la adición de dos restricciones elásticas, lo que nos permitió gobernar y proporcionar una descripción completa de las estructuras poligonales, así como cuantificar y contrastar nuestros resultados con datos experimentales. Nuestros hallazgos nos permitieron predecir y tener control sobre la microestructura final, proporcionar una descripción concluyente sobre la forma correcta de capturar características microestructurales en sistemas poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación en un régimen no elástico. Adicionalmente, para el modelamiento multi-escala del proceso de deformación elástica no-lineal de las microestructuras poligonales, el funcional fue reescrito, agregando términos adicionales a la energía elástica libre (aquella debida a los grados de libertad en la orientación del agregado poligonal), así como la energía elástica libre propia del grano (debida a la configuración propia del material) y la energía elástica libre debido a la existencia de las fronteras de grano. Estas descripciones son cruciales para describir transiciones estructurales de fase, así como la inclusión de la anisotropía de orientación cristalográfica, la cual modifica la respuesta mecánica de los agregados poligonales, controlando tanto la respuesta completa del agregado como la forma de las distribuciones locales de los campos de

esfuerzo-deformación; cuyos valores extremos gobiernan los procesos de falla. En este sentido, proponemos un nuevo marco para modelar la respuesta no-lineal de un agregado poligonal debido a una deformación externa aplicada mediante el acoplamiento de la evolución microestructural junto con la solución de los campos de esfuerzos. Para la solución de las ecuaciones de elasticidad se implementó el método de funciones de base radial no simétrica (solución en el continuo). Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema y tiene en cuenta explícitamente la interacción de largo alcance inducida por la compatibilidad de los esfuerzos entre el conjunto de granos y el efecto de la distribución del tamaño de grano. Mediante el acoplamiento del tensor de rigidez en función de la orientación del cristal y las interacciones elásticas, logramos simular la evolución de los granos por una carga externa. Aplicamos el modelo para simular la carga de tracción uniaxial en tres microestructuras diferentes con tamaño de grano medio de $20\ \mu\text{m}$, $30\ \mu\text{m}$ y $40\ \mu\text{m}$ usando teoría de elasticidad lineal para describir la evolución estructural.

Palabras clave: Simulación Monte Carlo, modelo Potts, difusión asistida por esfuerzos, agregado poligonal, deformación a alta temperatura.

POLYGONAL MICROSTRUCTURES UNDER NON-LINEAR ELASTIC DEFORMATION CONDITIONS

Juan D. Ospina-Correa

THE development of a certain degree of control over the mechanical properties of materials with polygonal microstructures, in the context of physical metallurgy or physical geology, is one of the main challenges in modern engineering, since it involves the ability to design, understand and modify characteristics specific microstructural elements of the aggregate. Conventionally, the primary mechanisms responsible for the behavior described by the Read-Shockley models are little known and only a few systematic investigations, on the grain limit mobilities, provide clues about the fundamental interactions that allow capturing all the characteristics of the set. Mechanisms such as the migration of boundaries, the mobility of grain boundaries and grain rotations, which could lead to the coalescence of neighboring domains by eliminating the common boundary between them, should be considered for a more detailed description of the aggregate. These mechanisms can be superimposed in complex ways so that the structure of conventional models is usually deduced from the fit with experimental data. In this sense, we develop and parameterize a phenomenological functional of free energy, theoretically informed, that allows to reproduce the microstructure of polygonal materials, as well as the implementation of a strategy for the solution process via energy minimization through Monte Carlo simulation. These allows us to reproduce the topological characteristics that are commonly observed in these aggregates, but also, it will enable us to control the average size and its distribution, allowing us as a simulator for the diction and control of the system. To achieve the objectives, we started by implementing a 2D extension of the modified Q -state Potts model, reproducing the already established results, but additionally we included energy penalties by adding two elastic constraints, which allowed us to govern and provide a complete description of the polygonal structures, as well as quantify and contrast our results with experimental data. Our findings enabled us to predict and have control over the final microstructure, provide a conclusive description of the correct way to capture microstructural characteristics in polygonal systems, establishing a platform to study more realistic systems and deformation phenomena in a non-elastic regime. Additionally, for the multi-scale modeling of the non-linear elastic deformation process of the polygonal microstructures, the functional one was rewritten, adding additional terms to the free elastic energy (that due to the degrees of freedom in the orientation of the polygonal aggregate), as well as the free elastic energy of the grain itself (due to the material's own configuration) and free elastic energy due to the existence of grain boundaries. These descriptions are crucial to describe phase structural transitions, as well as the inclusion of the crystallographic orientation anisotropy, which modifies the mechanical response of the polygonal aggregates, controlling both the complete response of the aggregate and the shape of the local distributions of the fields of effort-deformation; whose extreme values govern the failure processes. In this sense, we propose a new framework for modeling the non-linear response of a polygonal aggregate due to an external deformation applied through the coupling of microstructu-

ral evolution together with the solution of stress fields. For the solution of the elasticity equations, the method of non-symmetric radial base functions (solution in the continuum) was implemented. Our approach encodes the elastic properties of the system and explicitly takes into account the long-range interaction induced by the compatibility of the stresses between the set of grains and the effect of the grain size distribution. Through the coupling of the stiffness tensor depending on the orientation of the crystal and the elastic interactions, we managed to simulate the evolution of the grains by an external load. We applied the model to simulate the uniaxial tensile load in three different microstructures with an average grain size of $20\ \mu\text{m}$, $30\ \mu\text{m}$ and $40\ \mu\text{m}$ using linear elasticity theory to describe the structural evolution.

Keywords: Monte Carlo simulation, Potts model, stress-assisted diffusion, polygonal aggregate, high temperature deformation.

Índice de figuras

1-1.	Esquema general de los contenidos y cómo estos están relacionados entre sí, junto con una breve descripción de cada sección	12
2-1.	Izquierda: efectos de la temperatura de calentamiento en el crecimiento del grano de cristales tipo austenita. (a) 800 °C; (b) 950 °C; (c) 1100 °C; y (d) 1250 °C. Modificado de [1]. Derecha: pompas de jabón. Modificado de: https://flic.kr/p/6WenHX	14
2-2.	Mapa de los Estados Unidos de América (2014): https://flic.kr/p/qpxiyH	15
2-3.	A: <i>Plagiomnium vesicatum</i> . B: Efectos microestructurales del ácido sulfúrico en el hielo. Esta es una imagen de sección transversal, polarizada cruzada de hielo policristalino que se ha llevado a una tensión de 5 % a una tasa de tensión constante, la prueba se realizó a -10°C en compresión uniaxial. C: tratamiento térmico para acero inoxidable AISI 316. D: burbujas de espuma de jabón	16
2-4.	Una microestructura evoluciona a través de un proceso de engrosamiento, en el cual las células pequeñas desaparecen y el tamaño celular promedio aumenta, de 99 a 35 granos. En el marco final, casi dos tercios de los granos han desaparecido; el área de grano promedio prácticamente se ha triplicado. Modificado de [2]	18
2-5.	Microfotografías (aún sin equilibrar) tomadas durante diferentes momentos de la evolución de una estructura granular en una simulación 2D del modelo de Potts mediante Monte Carlo. Los granos pequeños se encogen y desaparecen y los granos grandes se hacen más grandes, por lo que el tamaño medio de los granos aumenta como consecuencia que la energía de la GB disminuya. Fuente propia	19
2-6.	(a) El tamaño medio del grano como una función del tiempo con el área media lineal en el tiempo. (b) La tasa de crecimiento del grano como una función de la temperatura. Modificado de Thompson [3].	21
2-7.	(A) evento de conmutación topológico de tipo I. (B) eventos de conmutación topológicos de tipo II (desaparición del grano). Los números indican el cambio en el número de lados de los granos después del evento de cambio y (C) ilustración para la derivación de la ley de Mullins-von Neumann.	25
2-8.	En el modelo de Potts, el movimiento de la GB se produce cuando un límite individual cambia de identidad para minimizar las energías de interacción con los granos vecinos. En el método de seguimiento frontal, los puntos en la GB se mueven con una velocidad relacionada con la curvatura local y otras fuerzas impulsoras y los puntos en las intersecciones de la GB se mueven para mantener un equilibrio de las tensiones de la GB. Modificado de Frost & Thompson [4].	31

2-9. (A) Distribución de Rayleigh (punto azul punteado), lognormal (punto negro punteado) y Hillert (punto verde punteado). (B) Distribuciones de número de caras para el crecimiento de grano normal en 3D y (C) Funciones de distribución de tamaño de grano propuestas: Lognormal (línea negra de puntos y rayas), Weibull (línea roja de puntos y rayas), Rayleigh (punto azul - línea de puntos); y la función propuesta por Hillert (línea verde de puntos y rayas) para el crecimiento de grano normal en 2D. Modificado de Anderson et al., [5]	36
2-10. Esquema de las tensiones internas en un agregado policristalino. Los diferentes colores denotan diferentes orientaciones cristalográficas. Las tensiones internas se pueden clasificar según la longitud característica sobre la cual se auto-equilibran. El estrés macroscópico (σ_I) es el estrés medio en una región relativamente grande que incluye un número significativo de granos. Dentro de un grano, las tensiones de segundo orden (σ_{II}) y tercer orden σ_χ pueden ser apreciadas. Fuente propia	36
2-11. Los agregados poligonales tienen una microestructura compuesta de cristales simples y GB. El comportamiento térmico y mecánico de la MP depende en gran medida de su microestructura, donde la textura (tamaños y orientaciones) de los cristales individuales y el área total de GB desempeñan un papel fundamental. Fuente propia	40
3-1. La discretización de una microestructura según el modelo clásico de Potts, donde cada punto de la red tiene un estado asignado. Los puntos de red también poseen una energía según la orientación del grano. Fuente propia	49
3-2. Esquema bidimensional de la evolución de grano de un sistema con límites periódicos. Fuente propia.	53
3-3. Secciones transversales de tres procesos para diferentes condiciones iniciales distintas junto con la microestructura de crecimiento de grano en estado estable resultante de ellas. Fuente propia.	55
3-4. A: distribución de lados para las secciones transversales de tres procesos para diferentes condiciones iniciales distintas. B: distribución de tamaños. Fuente propia.	58
3-5. comportamiento del área de los granos para todas las temperaturas y ángulos evaluados donde el sistema incrementar monótonicamente con la evolución del proceso, siguiendo una conducta como la descrita por von Neumann-Mullins. Fuente propia.	61
4-1. Rotaciones de CO que permiten la coalescencia de los granos vecinos mediante la eliminación de GB comunes entre ellos a través de la migración de la GB de un grano a otro (junto con rotación de grano), la parte del segundo grano es cubierta por el movimiento del límite que cambiará su orientación cristalográfica a la del primero. Fuente propia	73
4-2. Metodología de trayectoria microestructural para la evolución del sistema en el que primero se garantiza la conservación del volumen del grano y luego se relaja su superficie. El punto de encuentro de ambas curvas es el punto de diseño para el tamaño deseado junto con sus mecanismos de rotación, coalescencia y migración. Fuente propia.	76
4-3. Microestructuras después de 10000 MCS. En la izquierda: (a) $\langle d \rangle = 20\mu\text{m}$, (b) $\langle d \rangle = 30\mu\text{m}$ y (c) $\langle d \rangle = 40\mu\text{m}$ de tamaño medio de grano. Microestructuras de AISI 304 tratadas térmicamente se muestran con el mismo tamaño de grano para comparación. Fuente propia.	78

4-4. Comparación, entre el modelo y muestras de acero inoxidable, de las distribuciones de tamaño de grano obtenida luego que el proceso está equilibrado (línea continua - modelo) y las mediciones para AISI 304 (línea de puntos). Fuente propia.	79
4-5. Ángulo de misorientación para las diferentes distribuciones de tamaño de grano en la estructura junto con su distribución de lados (recuadro interno) mostrando que el nuevo modelo logra las configuraciones geométricas y topológicas de sus predecesores. Fuente propia. . . .	81
4-6. (a) Restricciones energéticas del volumen y la superficie (en unidades adimensionales); (b) muestra los resultados de la parametrización para obtener los tamaños promedio y seguir el comportamiento descrito en la Figura 4-2. Fuente propia	83
4-7. Transformada de Fourier inversa para los resultados de la simulación de $10\mu\text{m}$, $15\mu\text{m}$ y $20\mu\text{m}$ de radio medio y los resultados experimentales con la correlación global calculada entre ellos. Fuente propia.	85
5-1. Representación gráfica de la Eq. (5-1). (a) Esquema para estimar la energía debida a la frontera de grano y la energía elástica debida a la estructura interior del grano. (b) Campos de deformación en la microestructura final luego del proceso de minimización a través del formalismo de muestreo utilizado en el que se pondera la influencia de los procesos de rotación/coalescencia. Fuente propia	94
5-2. Esquema 3D de un sistema policristalino sometido a deformación. A lo largo del eje-x, consideramos condiciones de frontera periódicas y a lo largo del eje-y podemos considerar dos condiciones de deformación diferentes: (i) desplazamiento constante y (ii) Carga constante. Fuente propia	98
5-3. Interpolación para la Variación del módulo de Young en un AISI 304. Usualmente se reporta que para un Fe-BCC el módulo en la dirección (111) es 270-280 GPa y en (100) es 120-130 GPa, para un promedio del orden de 200 GPa, valor común para el diseño.	102
5-4. Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 10 micras.	105
5-5. Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 15 micras.	107
5-6. Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 20 micras.	108
5-7. Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 20 micras.	110

Contenido

Agradecimientos	IV
Resumen	V
Abstract	VII
1. INTRODUCCIÓN	3
1.1. Problema de investigación	6
1.2. Objetivos	9
1.2.1. Objetivo general	9
1.2.2. Objetivos específicos	9
1.3. Descripción general de la tesis	10
1.3.1. Esquema de la tesis	10
2. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE	13
2.1. Introducción	13
2.2. Estructuras granulares poligonales	14
2.3. Sistemas poligonales en 2D	17
2.4. Aproximaciones fenomenológicas	19
2.4.1. Burke & Turnbull	19
2.4.2. Aplicación del teorema de Euler	21
2.4.3. Aproximación de Lewis	22
2.4.4. Aproximación de Aboav-Weaire	23
2.4.5. Eventos topológicos de intercambio	24
2.4.6. Aproximación de von Neumann-Mullins	25
2.5. Aproximaciones de campo medio	26
2.5.1. Aproximación de Hillert	27
2.5.2. Aproximación de Louat	28
2.5.3. Aproximación por modelos híbridos	29
2.5.4. Aproximaciones de campo medio basadas en las descripciones de von Neumann-Mullins	29
2.6. Desarrollos en simulación	30
2.7. Desarrollos experimentales	33
2.8. Sistemas 3D	33
2.8.1. Modelamiento de sistemas 3D	34

2.8.2. Simulación de sistemas 3D	35
2.9. Influencia del tamaño en las propiedades mecánicas del agregado	37
2.9.1. Influencia en la resistencia	38
2.9.2. Hall-Petch y la resistencia en agregados poligonales	41
3. SIMULACIÓN DE MICROESTRUCTURAS POLIGONALES	45
3.1. Propiedades geométricas y topológicas de estructuras canónicas	46
3.2. Aproximación clásica	47
3.3. Modelo clásico de Potts	48
3.4. Esquema convencional de Potts	48
3.5. Estado estacionario canónico	54
3.6. Caracterización	56
3.6.1. Cantidades puntuales	56
3.6.2. Ley de Lewis, ley de Feltham y generalizaciones	60
3.7. Conclusiones	62
4. FUNCIONAL FENOMENOLÓGICO, MODIFICADO, DE ENERGÍA LIBRE	65
4.1. Introducción	66
4.2. Metodología	68
4.3. Formulación del modelo	70
4.4. Mecanismos de transformación y esquema de muestreo	72
4.5. Metodología de trayectoria microestructural	75
4.6. Microestructuras desarrolladas y caracterización	77
4.7. Conclusiones	87
5. MICROESTRUCTURAS BAJO DEFORMACIÓN ELÁSTICA NO-LINEAL	89
5.1. Introducción	90
5.2. Formulación del modelo	92
5.3. Caracterización de las microestructuras desarrolladas	99
5.3.1. Propiedades elásticas en policristales	101
5.3.2. Deformación elástica	104
5.4. Conclusiones	109
6. Resumen, conclusiones y recomendaciones	113
A. Anexo: rol de las restricciones geométricas	119
Referencias.	125

DECLARACIÓN

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Let me state that I have done this thesis autonomously and with the only help of the means allowed and not different from those mentioned in the thesis itself. All the passages that have been taken of a textual or figurative way of published and unpublished texts, I have recognized them in the present work. No part of the present work has been used in any other type of thesis.

Medellín, 2019

Juan D. Ospina-Correa

© Copyright by Juan D. Ospina-Correa

All Right Reserved

2019

1. INTRODUCCIÓN

Los procesos de transporte que ocurren a escala microestructural son un componente fundamental en la comprensión de la conducta de sistemas poliestructurados, sistemas como estructuras metálicas, algunos sistemas cerámicos, incluso minerales, sistemas celulares (espumas de jabón o cuerpos celulares) son particularmente sensibles a estos procesos. La respuesta del sistema debida a estos procesos define las propiedades del agregado; lo que significa que los componentes fundamentales del sistema, constituidos por estructuras poligonales denominadas granos (cristales), muestran un comportamiento diferente en función del tamaño y la distribución de estructuras vecinas y esta conducta colectiva define las propiedades macroscópicas del sistema.

En tres dimensiones, estas estructuras se agrupan en poliedros, completamente densos, que se unen para llenar el espacio. Una frontera de grano (GB) ocurre cuando dos granos (con diferentes orientaciones angulares) se juntan en un plano [6]. La microestructura y lo que ella representa es la característica fundamental de estos sistemas. Las propiedades del agregado están fuertemente afectadas por la naturaleza, tamaño, forma y distribución de sus componentes fundamebtales; así como por la configuración angular que emerge en la GB [7–10]. Este es el caso particular de propiedades mecánicas como la resistencia, la tenacidad, la fragilidad y la difusividad (dominada por GB), pero también es el caso de propiedades ópticas, eléctricas y magnéticas [11].

Al nivel de la GB y debido a que los enlaces atómicos están rotos, los límites (energía libre por unidad de área) contribuyen a la energía total del sistema. Cuando las microestructuras poligonales son sometidas a alta temperatura (durante el procesamiento o puesta en servicio) los granos evolucionan (cambian o se transforman) como mecanismo principal de disipación, disminuyendo el área de la GB y, por lo tanto, la energía total del sistema. El proceso de migración de la GB, el cual ocurre en sólidos cristalinos, es denominado como crecimiento de grano [12–14] donde la fuerza termodinámica impulsora es la reducción de la energía libre de Gibbs en la intercara [3, 15, 16]. De esta manera, la migración de la GB resulta en el crecimiento de algunos granos y en la reducción y/o desaparición de algunos otros, incrementando su tamaño medio [17, 18]. Dado que el tamaño y la forma del grano son un factor determinante a la hora de establecer las propiedades mecánicas del sistema, es fundamental comprender estos procesos de transformación y analizar cómo esto afecta los materiales en ingeniería.

Convencionalmente, bajo esta premisa, y en contraste con procesos como la recristalización, la nucleación de nuevos granos no ocurre [3, 19]. El aumento del tamaño medio del grano $\langle d \rangle$, bajo

condiciones ideales, escala como potencia del tiempo ($\langle d \rangle \sim t^\alpha$) y convencionalmente se describe como un proceso auto-similar en el que la microestructura se agrupa y crece [20–22], y su distribución normalizada se torna invariante en el tiempo. Desde este punto, definir relaciones entre los procesos responsables por la respuesta de una microestructura y la temperatura ha sido, durante mucho tiempo, un tema de interés para las comunidades académicas [23–25]; ya que estas relaciones permiten una mejor comprensión de fenómenos de deformación y representan un aspecto esencial para dilucidar los procesos de transformación implicados. El crecimiento dinámico del grano, es decir, el crecimiento del grano inducido por procesos de deformación, representa bien la búsqueda de éste tipo de relaciones [26–30]. Este fenómeno afecta el comportamiento del sistema, aumentando o disminuyendo la velocidad a la cual la deformación procede.

Una praxis común para mejorar las propiedades del agregado, es disminuir $\langle d \rangle$. La consecuencia de someter a alta temperatura éste tipo de estructuras (con estos tamaños reducidos) es que se potencian procesos críticos (deslizamiento, migración, coalescencia y rotación del grano) en la GB que contribuyen notablemente a la transformación del agregado. El deslizamiento al límite de grano requiere de tensiones intra y trans-granulares como fuerza impulsora. La temperatura favorece la auto-difusión en la GB y puede estar presente incluso en ausencia de tensiones externas, los demás son procesos convencionales de disipación de energía los cuales se vuelven activos cuando las tensiones sobre el sistema están presentes. Bajo condiciones de tensiones externas, se induce un flujo neto de materia de las regiones que están a compresión hacia las áreas en tensión, lo que conduce (junto con la contracción lateral) a la modificación de la estructura granular. Este fenómeno se conoce como Coble-creep [31]. En algunos casos, y bajo condiciones muy específicas, en la GB se puede dar un proceso de deslizamiento entre granos conocido como Lifshitz *sliding*.

Fenómenos como la difusión en la GB, la rotación de grano, la coalescencia y la migración pueden tener lugar incluso en ausencia de tensiones externas al sistema, sin embargo, estos mecanismos pueden acelerarse por la acción de un estado de esfuerzos inducidos o por esfuerzos residuales. Desde el enfoque de Coble-creep, se ha establecido que el efecto del crecimiento dinámico del grano, durante el proceso de deformación, y que va en detrimento de las propiedades del material, disminuye la tasa de cedencia ($\dot{\epsilon} \sim \sigma \langle d \rangle^{-p}$), donde σ es el campo de tensiones sobre el agregado y p es una constante que generalmente toma valores ~ 3 . Adicional a esta conducta, hay evidencia experimental que sugiere que la tasa de deformación también puede disminuir durante el proceso, a pesar de, o quizás, debido a la disminución del área total de la GB, limitando los mecanismos de disipación de energía del sistema. En este sentido, Ashby & Gifkins [32–34] señalaron la existencia de casos donde el deslizamiento, durante procesos de fluencia (y superplasticidad), se debía al proceso de acomodación de los bordes de grano por migración de la GB. Propusieron modelos de carácter fenomenológico para explicar los mecanismos responsables y cómo éstos se relacionan entre sí, produciendo los patrones microestructurales de deformación observados. Algunos otros han propuesto que el movimiento de la GB surge de cambios a nivel atómico, bajo el nivel de tensión aplicado, así como modelos cooperativos para la respuesta microestructural [24, 35–37].

Usando una aproximación diferente (no desde el continuo o desde la escala atómica como los modelos de Ashby o Moldovan); Kim et al., [35, 37], utilizaron un modelo a escala mesoscópica para simular la evolución microestructural de sistemas policristalinos bajo diferentes condiciones. Sus resultados sugieren que el esfuerzo aplicado no solo induce la migración de la GB (como ya había sido teorizado por Coble) sino que, además, los flujos difusivos son fuertemente afectados por la no uniformidad de las fronteras de grano. Lo que hasta entonces era un resultado no previsto, pues todos los modelos habían idealizado las estructuras. Kim et al., [35] demostraron que las distribución de tamaños de granos y las formas de los granos pueden atenuar o incrementar los procesos difusivos. Sus resultados sugieren que las no-homogeneidades cambian los flujos difusivos, porque los segmentos de GB de diferentes longitudes exhiben curvaturas diferentes, y por lo tanto, diferentes gradientes de potencial químico a través de ellos.

Una comprensión exhaustiva y descriptiva del complejo acoplamiento entre los mecanismos de migración de la GB, responsables por el crecimiento estático y dinámico del grano, los procesos de deformación, la transformación microestructural y su influencia sobre las propiedades mecánicas del sistema aún está por surgir, y hace parte importante de la búsqueda de esta tesis. Descripción en la que pueda ser incluida el efecto de las características que surgen de las distribuciones en la forma y el tamaño del grano, características físicas asociadas con la descripción de información cristalográfica y su relación entre los granos vecinos. Todo esto, con el ánimo de facilitar los procesos experimentales de diseño y de caracterización, así como los modelos de predicción de propiedades, estableciendo una plataforma virtual de análisis mecánico-microestructural. Estas complejas interacciones cooperativas (potenciadas por la temperatura) son las responsables de la transformación del sistema.

Siguiendo los trabajos de Moldovan et al., [24] y Cocks et al., [38–40], basados en cálculos iterativos, estocásticos, de minimización de funcionales de energía libre, de tal manera que la transformación esté dominada por la minimización global de energía del sistema, en este trabajo analizamos la transformación de microestructuras de agregados poligonales a través de simulación Monte Carlo, utilizando un funcional fenomenológico de energía libre modificado, teóricamente informado, junto con un muestreo inteligente que permite hacer mímica de los mecanismos de transformación previamente descritos, obligando a que el sistema no quede atrapado en mínimos de energía locales.

Entonces, en este trabajo, implementamos una extensión 2D del modelo de Potts (para la generación de microestructuras) donde se conserva la migración de los límites de grano pero adicionalmente se incluyen penalidades energéticas mediante la adición de términos (restricciones elásticas) que se suman a la energía total para reproducir las características topológicas que se observan en sistemas reales, permitiéndonos gobernar la respuesta física del agregado. Para evolucionar el modelo fue necesario la implementación de un muestreo inteligente que permite hacer mímica a los mecanismos de transformación (rotación / coalescencia del grano), otorgándonos control sobre la forma y el tamaño de la microestructura final. Además, proporcionamos una descripción teórica

exhaustiva del comportamiento del agregado, correctamente cuantificado y contrastado experimentalmente. Nuestros hallazgos proporcionan conocimiento concluyente sobre la transformación de estructuras poligonales, estableciendo una plataforma para el estudio de sistemas realistas y fenómenos de deformación.

1.1. Problema de investigación

La transformación microestructural de sistemas poligonales, debido a diversos mecanismos de evolución y potenciada por el estado de esfuerzos local, es un fenómeno de alto interés, pues es un proceso de deformación primaria durante condiciones de servicio, puesto que cambia la distribución de tamaños del material y por ende sus propiedades [23]. En materiales de grano fino, donde la reducción aumenta la relación de la GB respecto al volumen total rápidamente (más que en materiales convencionales), la constante migración de la GB promueve procesos de deformación; estos procesos ocurren debido al flujo difusional de átomos entre granos vecinos. Este proceso sugiere que la deformación incrementa rápidamente con el inverso cúbico del tamaño medio de grano ($\dot{\epsilon} \sim 1/\langle d \rangle^3$). Para tamaños mayores, los átomos pueden difundirse, además de la GB, a través del grano si la temperatura es lo suficientemente alta. Este proceso sugiere que la deformación incrementa rápidamente con el inverso cuadrático del tamaño medio de grano; fenómeno con una cinética menor que la de Coble pero con solución analítica ($\dot{\epsilon} \sim 1/\langle d \rangle^2$), aunque las temperaturas a las cuales está activo son cercanas al punto de fusión del material. A escala del grano, algunos modelos han establecido que la dependencia entre el tamaño y la tasa de deformación es lineal, aproximación conocida como **Harper-Dorn creep** [41]. Por otro lado, cuando los mecanismos de movimiento de dislocaciones empiezan a emerger y se vuelven importantes (lo que puede fomentar fenómenos de plasticidad cristalina) la dependencia entre ellos se denomina **Mukherjee-Bird-Dorn creep** ($\dot{\epsilon} \sim (1/\langle d \rangle)^p$) la cual es una descripción fenomenológica del proceso de daño, donde p puede tomar valores entre $\sim (1 - 5)$, aproximación preferida por la literatura para describir el proceso por su fácil parametrización experimental.

De manera general, los procesos difusivos que potencian creep están significativamente afectados por características inherentes del material, aspectos como forma, tamaño y distribución, analíticamente han sido representados como la dependencia inversa con el tamaño $\langle d \rangle^2$ y $\langle d \rangle^3$. De esta manera, sobresale **Coble-creep** como uno de los mecanismos más importantes de deformación, en el cual, para ajustar la evolución continua de la forma del grano y mantener la integridad del sólido algunos procesos de re-acomodación (migración y relajación de la GB, rotación del grano y coalescencia) pueden ocurrir, aunque no necesariamente de manera secuencial [42]. Durante **Coble-creep**, el transporte de masa en las inmediaciones del grano, ocurre a lo largo de las regiones que están a compresión hacia las zonas a tracción y los flujos difusivos locales están determinados por el estado local de esfuerzos [24].

El fenómeno completo de daño surge a través de la interacción entre diversas características físicas del agregado en transformación; aspectos relacionados con la distribución del tamaño, forma del vecindario del grano, forma del grano y distribución de los ángulos de misorientación (descripción de las dislocaciones de bajo ángulo) entre los granos vecinos, modifican la respuesta local del sistema [25, 35, 43]. Estos descriptores pueden producir fuertes cambios en la energía asociada al material y, de esta manera, definir su conducta ante una carga aplicada [23, 25, 35, 43]. Lo anterior permite inferir que el comportamiento de la microestructura, sometida a Coble-creep, es difícil de predecir ya que generalmente está fuertemente determinado por características inherentes de la microestructura y cómo éstas cambian, así como de las condiciones que se imponen sobre el sistema, haciendo del proceso de deformación uno de los retos académicos a superar en la actualidad.

Debido a la heterogeneidad microestructural del agregado y para preservar su integridad, los esfuerzos normales en las GB pueden presentar valores superiores (de manera local) al límite de cedencia del material [23]. Desde un punto de vista experimental, existe una dificultad inherente en la medición de la distribución de esfuerzos a lo largo de la GB y esta dificultad es marcada cuando el sistema está sometido a procesos de deformación y alta temperatura, por lo que no existen datos experimentales directos que permitan correlacionar de manera apropiada la transformación real de las características microestructurales y la distribución de tensiones a lo largo del grano, impidiendo de esta manera diseñar contra creep. Por esta razón, esfuerzos computacionales y aproximaciones teóricas son una de las mejores opciones que han empezado a dar luces sobre la forma en que las distribución de esfuerzos (no sólo al interior del material, sino al interior del grano) influyen los procesos de transformación del sistema.

En 1970's, Ashby & Gifkins, propusieron un modelo analítico de deformación de sistemas metálicos policristalinos en los que el mecanismo principal de transformación era el deslizamiento por fronteras de grano y cuya fuerza impulsora era una fuerza viscosa. Por otro lado, Schneibel et al., [44, 45] propusieron una teoría para Coble-creep sobre estructuras de granos regulares para predecir la distribución de esfuerzos y la velocidad inicial del movimiento de la GB. Con base en este trabajo, Ford et al., [46] modelaron la distribución de esfuerzos normales y las trayectorias de deformación para diferentes microestructuras policristalinas regulares y Moldovan et al., [24], usando un enfoque similar, determinó las zonas de altas concentraciones de esfuerzos, controladas por difusión en la GB, para policristales en presencia de inhomogeneidades tanto en la topología del grano como en la difusividad de la GB.

Pese a que los modelos de Coble y Nabarro proporcionan una visión profunda de la fenomenología y la física del proceso de deformación, aún existen dificultades a la hora de presentar una solución genérica, sin la necesidad de aludir a geometrías altamente idealizadas. Como resultado, las simulaciones computacionales se han convertido en la herramienta más prometedora para la investigación sistemática del comportamiento de cedencia de estructuras poligonales no uniformes. Por esta vía, se han desarrollado dos enfoques de simulación mesoscópica en los últimos años: (i)

desarrollado por Hazzledine & Schneibel [44], en el cual los flujos difusionales y las velocidades de cada nodo (sobre un sistema discretizado) estaban determinados por un sistema de ecuaciones lineales, derivadas imponiendo explícitamente condiciones de contorno, de conservación de masa, de compatibilidad de velocidad a lo largo de cada GB y uniones triples. (ii) Cocks et al., [38–40] extendiendo lo ya desarrollado por Ch’ng & Pan [36,47], donde un conjunto de formulaciones en elementos finitos y principios variacionales, para sistemas disipativos, permitieron desarrollar una microestructura y luego por difusión transformarla. En ambos enfoques se discretizó la microestructura al introducir puntos nodales solo a lo largo de la GB y en las uniones triples, describiendo así la deformación con respecto al campo de los flujos difusionales y las velocidades de cada nodo.

En este sentido, en este trabajo desarrollamos y parametrizamos un funcional fenomenológico de energía libre, informado teóricamente, que permite capturar la microestructura de materiales poligonales, junto con su proceso de solución vía minimización energética a través de simulación Monte Carlo, lo que nos habilita para reproducir las características topológicas que se observan comúnmente, pero además, nos permite controlar el tamaño medio y la distribución final del agregado, lo que a su vez permite el diseño y el control del sistema. Para lograr este objetivo, empezamos por implementar una extensión 2D del modelo Q -state Potts modificado, en el que incluimos penalizaciones energéticas mediante la adición de dos restricciones elásticas, lo que nos permite proporcionar una descripción completa de las estructuras poligonales, así como cuantificar y contrastar nuestros resultados con datos experimentales. Nuestros hallazgos nos permitieron predecir y tener control sobre la microestructura final, proporcionar un conocimiento concluyente sobre la forma correcta de capturar características microestructurales en sistemas poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación en un régimen no elástico.

Adicionalmente, para el modelamiento multi-escala del proceso de deformación elástica no lineal de las estructuras poligonales, el funcional fue reescrito agregando términos adicionales como la energía elástica libre debido a los grados de libertad en la orientación del agregado poligonal, la energía elástica libre propia del grano y la energía elástica libre debido a la existencia de las fronteras de grano, aspectos cruciales para describir transiciones estructurales de fase, así como incluir la anisotropía de orientación cristalográfica que modifica las propiedades, controlando tanto la respuesta completa del agregado como la forma de las distribuciones locales de los campos de esfuerzo-deformación; cuyos valores extremos gobiernan los procesos de falla. En este sentido, proponemos un nuevo marco para modelar la respuesta no lineal de un agregado poligonal a una deformación externa aplicada mediante el acoplamiento de la evolución microestructural con la solución de los campos de esfuerzos a través del método de funciones de base radial no simétrica.

Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema y tiene en cuenta explícitamente la interacción de largo alcance inducida por la compatibilidad de los esfuerzos entre el conjunto de granos y el efecto de la distribución del tamaño de grano. Mediante el acoplamiento del tensor de rigidez en función de la orientación del cristal y las interacciones elásticas, logramos la evolución

de los granos por una carga externa. Aplicamos el modelo para simular la carga de tracción uniaxial en tres microestructuras diferentes con un tamaño de grano medio de $20\ \mu\text{m}$, $30\ \mu\text{m}$ y $40\ \mu\text{m}$ usando teoría de elasticidad lineal para describir la evolución estructural. Investigamos la respuesta constitutiva del sistema y la comparamos con la respuesta continua con el propósito de comprender el rendimiento mecánico en las estructuras.

1.2. Objetivos

Los procesos de transformación que ocurren a alta temperatura o durante periodos prolongados de tiempo y que modifican la microestructura de sistemas poligonales (sistemas metálicos o minerales) son quizás uno de los atributos más importantes a considerar durante el diseño y el control de propiedades mecánicas y por lo tanto, se vuelven un aspecto relevante para la predicción de sistemas bajo condiciones de servicio.

1.2.1. Objetivo general

En este sentido, el objetivo principal fue desarrollar un esquema computacional que permita el diseño de estructuras poligonales y de esta manera estudiar su conducta bajo condiciones de deformación elástica no-lineal, dando una aproximación a a fenómenos como creep. Este enfoque se basa en la implementación de una extensión 2D del modelo Q -state Potts modificado, en el que incluimos penalizaciones energéticas mediante la adición de dos restricciones elásticas, lo que nos permite proporcionar una descripción completa de las estructuras poligonales, así como cuantificar y contrastar nuestros resultados con datos experimentales.

1.2.2. Objetivos específicos

- Desarrollar un modelo, informado teóricamente, para capturar las características fundamentales de sistemas poligonales, a través de un funcional fenomenológico de energía libre modificado, que permita proporcionar información sobre la morfología y la topología de la red de granos.
- Implementar un muestreo inteligente que permita hacer mímica de los diferentes mecanismos de transformación (migración, rotación y coalescencia) del agregado poligonal, impulsando a que el sistema no quede atrapado en mínimos locales de energía, otorgando control sobre el tamaño medio del sistema.

- Simular la distribución de los campos de esfuerzo y deformación para diferentes tamaños medios, bajo las siguientes condiciones: (i) carga constante y (ii) desplazamiento constante; proporcionando una idea del efecto del tamaño sobre la distribución de los campos de deformación.

1.3. Descripción general de la tesis

1.3.1. Esquema de la tesis

Esta tesis esta organizada en seis capítulos. La figura 1-1 presenta un esquema general de los contenidos y como éstos están relacionados entre si. Una breve descripción de cada sección se describe a continuación: **Capítulo 1:** presenta una introducción general al documento, así como al problema de investigación y a los objetivos de la tesis, resaltando los propósitos principales del trabajo. **Capítulo 2:** presenta una revisión bibliográfica extendida de los procesos que gobiernan la evolución del sistema y los antecedentes del modelo; se habla de la observación experimental que se ha hecho sobre el fenómeno y las aproximaciones computacionales que se han presentado, así como de la importancia del tamaño de grano en estructuras poligonales. **Capítulo 3:** Presenta el enfoque de simulación planteado, la forma en la cual se construyó el modelo, cómo se procede para informarlo teóricamente, cómo se procede para la construcción de sistemas poligonales; además se presenta un esquema de transformación a partir de tres posibles mecanismos, la migración de la frontera (proceso controlado por la difusión al límite de grano), la movilidad del límite del grano (la cual aumenta significativamente con la variación relativa del ángulo de misorientación cristalográfica) y las rotaciones del sistema (las cuales pueden conducir a la coalescencia de los dominios vecinos a través de la eliminación de los límites de grano común entre los dominios). En cada caso, el proceso puede acoplarse con o sin rotación de grano. Incluso si el mecanismo de coalescencia no avanza, la rotación rígida del grano puede contribuir a disminuir la energía total en el sistema. **Capítulo 4:** El objetivo de este capítulo es el desarrollo de cierto grado de control sobre la forma, el tamaño y la distribución en materiales con estructura poligonal, en el contexto de la metalurgia física o la geología física, es uno de los principales desafíos en la ingeniería moderna, ya que implica la capacidad de comprender y modificar las características específicas del agregado. Convencionalmente, los principales mecanismos implementados y descritos por la ecuación de Read-Shockley son poco conocidos, y solo pocas investigaciones sistemáticas sobre las movilidades de los límites de grano proporcionan algunas pistas sobre las interacciones fundamentales que permiten capturar todas las características del conjunto. Algunos de estos son la migración de los límites, la movilidad de los límites de grano y las rotaciones de grano que conducen a la coalescencia de los dominios vecinos a través de la eliminación del límite común entre ellos. Estos mecanismos pueden superponerse de maneras complejas por lo que sus descriptores generalmente se deducen de los datos experimentales. En este sentido, proponemos un funcional fenomenológico de energía libre, teóricamente informado, para capturar la microestructura de

agregados poligonales lo que nos permite reproducir las características topológicas que se observan comúnmente, además, nos permite controlar la estructura física del agregado, que a su vez permite el control del sistema. En este sentido, implementamos una extensión 2D del modelo Q -state Potts modificado en el que incluimos penalidades energéticas logradas mediante la adición de restricciones elásticas, lo que nos permite proporcionar una descripción teórica completa de los agregados poligonales, así como cuantificar y contrastar nuestros resultados con datos experimentales. Nuestros hallazgos nos permiten predecir y tener control sobre la microestructura final, proporcionar un conocimiento concluyente sobre la forma correcta de capturar las características microestructurales en sistemas poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación en un régimen elástico. **Capítulo 5:** El objetivo de este capítulo fue incluir la anisotropía de la orientación cristalográfica para describir las propiedades de los agregados poligonales, esto controla tanto la respuesta completa de los agregados como la forma de las distribuciones locales de tensión y/o deformación; cuyos valores extremos gobiernan los procesos de falla. En este sentido, proponemos un nuevo marco para modelar la respuesta no lineal de un agregado poligonal ante una deformación externa aplicada mediante el acoplamiento de la evolución microestructural, en dos dimensiones con la solución del campo de esfuerzos en régimen elástico a través del método de funciones de base radial no simétrica. Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema y tiene en cuenta explícitamente la interacción de largo alcance inducida por la compatibilidad de los campos de tensión entre el conjunto de grano y el efecto de la distribución del tamaño de grano. Mediante el acoplamiento del tensor de rigidez en función de la orientación del cristal y las interacciones elásticas lo que permite la evolución de los granos por una carga externa. Aplicamos el modelo para simular una carga de tracción uniaxial en tres microestructuras diferentes, con un tamaño de grano medio de $20 \mu\text{m}$, $30 \mu\text{m}$, y $40 \mu\text{m}$. Investigamos la respuesta constitutiva del sistema y la comparamos con la respuesta continua con el propósito de comprender el rendimiento mecánico en estructuras poligonales. Adicionalmente, se muestra como los cambios complejos de la microestructura están controlados por la anisotropía de la orientación cristalográfica y la vecindad inmediata del grano, particularmente aquellas adyacentes a lo largo del eje de carga. Finalmente, **Capítulo 6:** presenta un resumen de los resultados, las conclusiones y los aspectos más relevantes de este trabajo, así como aspectos relacionados con trabajos futuros.

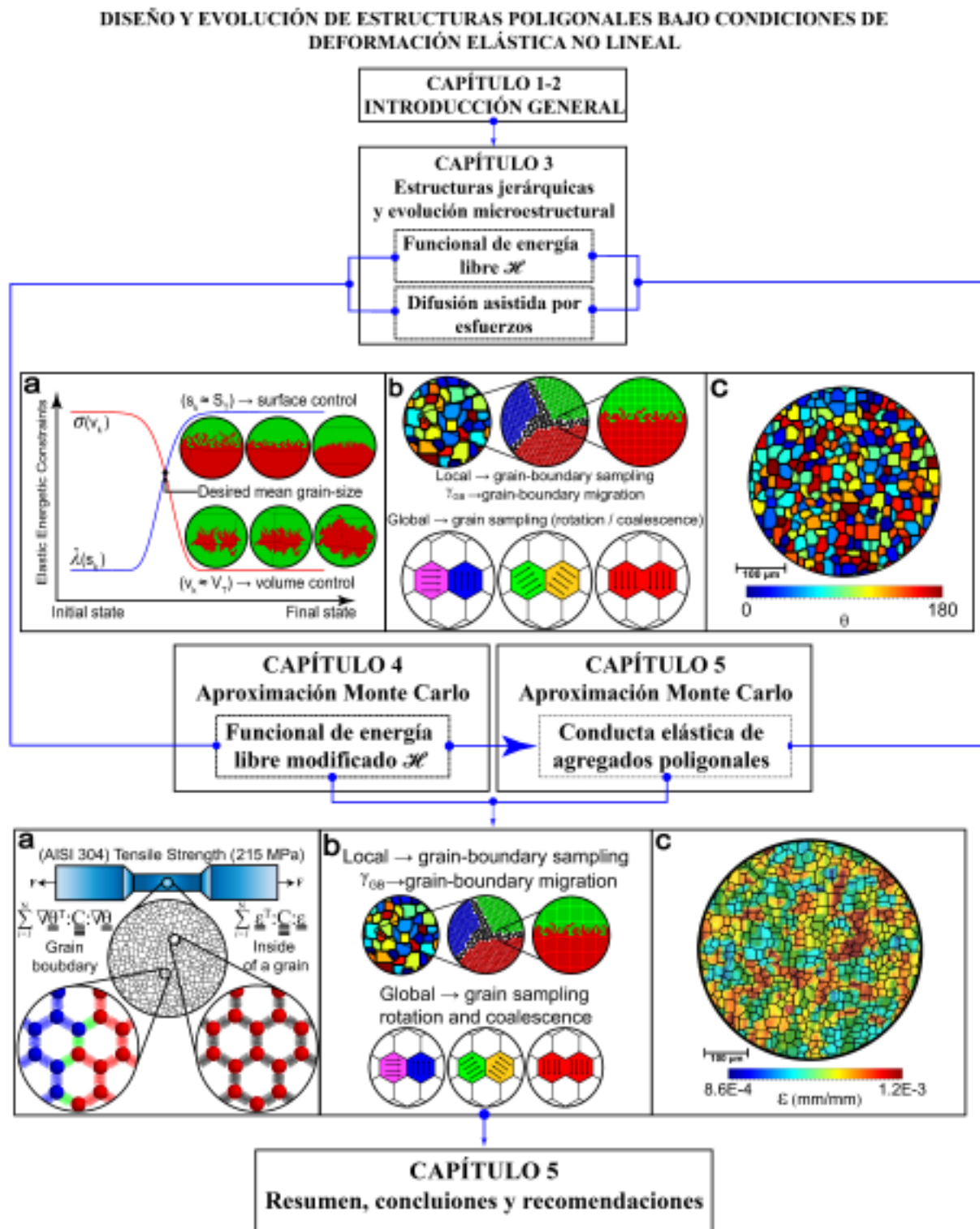


Figura 1-1. Esquema general de los contenidos y cómo estos están relacionados entre si, junto con una breve descripción de cada sección

2. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE

2.1. Introducción

Esta tesis se centra en los problemas que surgen al estudiar, desde un punto de vista físico, muchos materiales convencionales. Si observamos una pieza de metal bajo un microscopio, podríamos encontrar que su estructura parece notablemente similar a la de la espuma de jabón. En la mayoría de los metales comunes, los átomos se organizan en grupos ordenados llamados granos (o cristales), muchos de los cuales se juntan para formar una pieza de metal más significativa. En la Figura 2-1 (izquierda) se puede ver una muestra de acero austenítico y sus cristales constituyentes, (derecha) una espuma típica, la cual se compone de burbujas individuales, cada una de las cuales es una pequeña bolsa de aire, rodeada por una fina película de jabón. Sin embargo, los dos ejemplos, que difieren en muchos aspectos importantes, comparten dos características similares. Primero, ambos exhiben una estructura granular poligonal, en la que una muestra más grande se divide en muchas piezas más pequeñas, o granos. Una segunda característica entre los metales y las espumas es la forma en que se transforman. Ambos sistemas cambian en un proceso llamado engrosamiento (*coarsening*), aunque a ritmos muy diferentes. Al engrosar, algunos granos crecen mientras que otros se encogen y desaparecen. A medida que desaparecen más granos, el tamaño promedio de los granos restantes aumenta constantemente, en este sentido la diferencia radica en la forma en que la superficie de ambos sistemas se relaja.

Este proceso de crecimiento se puede observar en experimentos directos. Si es posible, se puede tomar una botella limpia y vacía y se vierte un poco de agua y jabón. Se agita la botella por unos segundos hasta que el recipiente esté lleno de espuma blanca. Se deja que la botella repose. Después de unas horas, la espuma cambiará drásticamente. Las diferencias de presión entre las burbujas vecinas conducen a la difusión de aire a través de las películas de jabón que separan las burbujas de jabón entre sí. Las burbujas grandes crecen y las más pequeñas desaparecen y aumenta el tamaño promedio de la burbuja de jabón. La microestructura de los metales evoluciona a través de un proceso muy similar. A temperatura ambiente, este proceso ocurre a velocidades demasiado lentas para observar durante un corto período. A altas temperaturas, este proceso puede acelerarse significativamente. En el engrosamiento, la termodinámica hace que los átomos se muevan a través

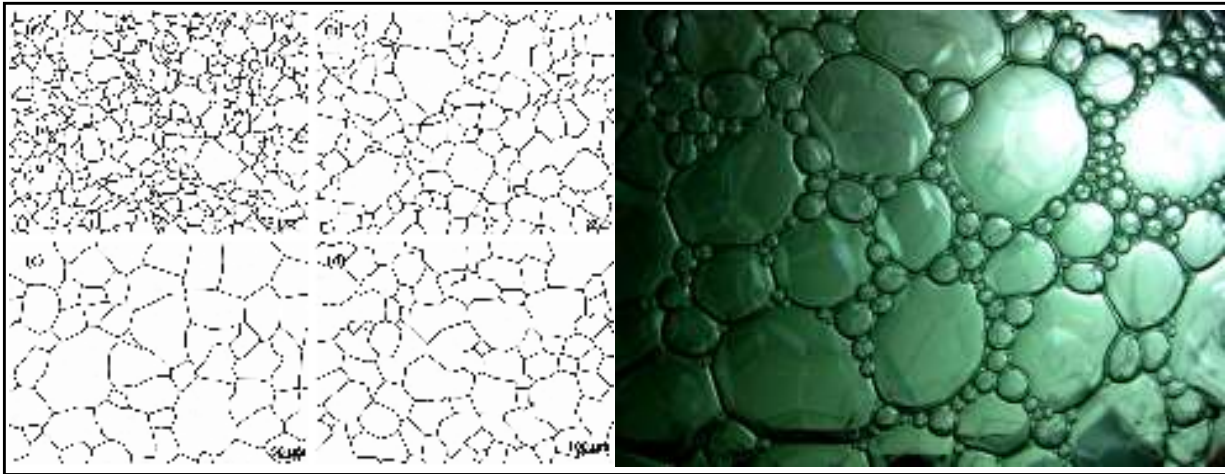


Figura 2-1.: Izquierda: efectos de la temperatura de calentamiento en el crecimiento del grano de cristales tipo austenita. (a) 800 °C; (b) 950 °C; (c) 1100 °C; y (d) 1250 °C. Modificado de [1]. Derecha: pompas de jabón. Modificado de: <https://flic.kr/p/6WenHX>

de el plano que separa los granos vecinos y, finalmente, hace que crezcan cristales más grandes y que los más pequeños se encojan y desaparezcan. Al igual que las burbujas de jabón, el tamaño promedio de un cristal aumenta constantemente con el tiempo. Además de afectar el tamaño y la topología del cristal promedio, el engrosamiento también cambia la microestructura del metal en otras formas importantes. Debido a que la estructura de una aleación afecta muchas de sus propiedades físicas, mejorar nuestra comprensión de cómo el engrosamiento cambia la microestructura del metal es un objetivo importante en el estudio de la ciencia de los materiales. Este capítulo proporciona una imagen general de las microestructuras 2D, la topología y el papel que desempeña la curvatura en el proceso de transformación.

2.2. Estructuras granulares poligonales

En términos generales, una estructura granular poligonal es un gran espacio dividido en muchas piezas más pequeñas que llamamos polígonos. En una estructura granular poligonal, o microestructura, no hay dos estructuras superpuestas. Cuando todas se juntan llenan todo el espacio. Como un ejemplo simple, considere la masa geográfica que constituye los Estados Unidos de América (mapa para 2014), Figura 2-2. Ignorando la precisión del mapa, podemos hacer muchas preguntas simples sobre esta estructura poligonal particular: ¿en promedio cuántos vecinos tiene cada estado? ¿Si un estado tiene muchos vecinos, sus estados vecinos también tendrán muchos vecinos? La respuesta a la primera pregunta es sorprendentemente simple: en promedio, los estados tienen aproximadamente seis vecinos. Este hermoso resultado se deriva del teorema de Euler en topología



Figura 2-2.: Mapa de los Estados Unidos de América (2014): <https://flic.kr/p/qpxiyH>

y algunos hechos sobre la energía asociada a las fronteras entre estados vecinos. La respuesta a la segunda pregunta es mucho más complicada y ha evadido muchos intentos de resolverla por completo. También podemos preguntar acerca de los aspectos geométricos de la estructura granular del mapa: los estados tienden a tener un tamaño similar, o ¿tenemos algunos estados muy grandes y muchos muy pequeños? ¿Cuál es la relación de aspecto entre el área terrestre de un estado y la longitud total de sus fronteras?, ¿existe una correlación entre el área de tierra de un estado y su número de vecinos?, ¿los estados grandes con muchos vecinos tienden a bordear otros estados grandes? Sin duda, estas preguntas no se limitan al estudio de grandes regiones geográficas, sino que, sin duda, pueden plantearse acerca de todo tipo de estructuras poligonales. De hecho, estas preguntas, y muchas más como ellas, motivan gran parte de la discusión en esta tesis.

Para tener una mejor idea de la ubicuidad de las microestructuras en la naturaleza, consideramos cuatro ejemplos muy diferentes que se encuentran cotidianamente. La Figura 2-3A muestra una porción de tejido de una la planta (*Plagiomnium*), un musgo nativo de climas húmedos. Si ignoramos los círculos verdes dentro de las células (los cloroplastos), podemos ver claramente la estructura de grano hexagonal de la muestra. La Figura 2-3B muestra una sección transversal,

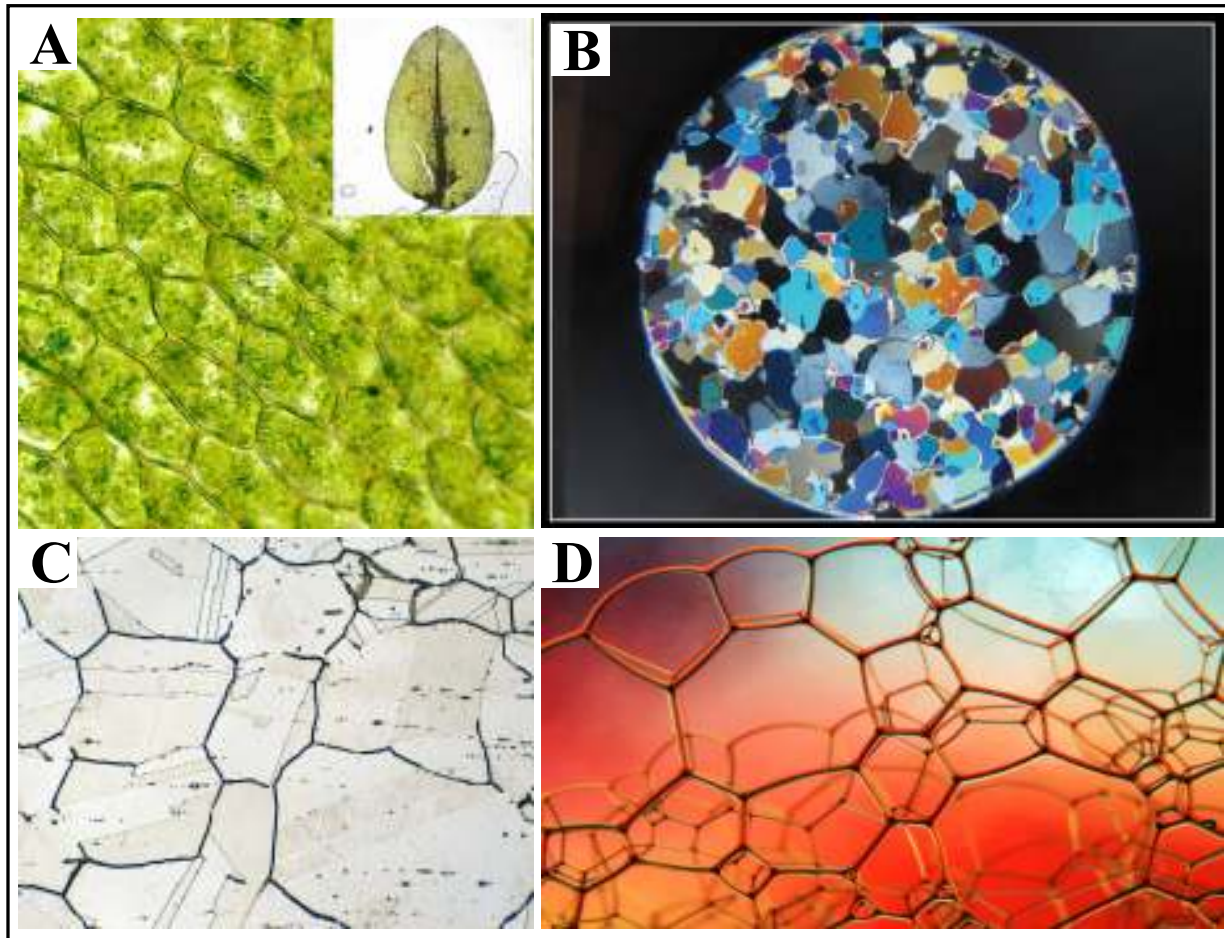


Figura 2-3.: A: *Plagiomnium vesicatum*. B: Efectos microestructurales del ácido sulfúrico en el hielo. Esta es una imagen de sección transversal, polarizada cruzada de hielo policristalino que se ha llevado a una tensión de 5 % a una tasa de tensión constante, la prueba se realizó a -10°C en compresión uniaxial. C: tratamiento térmico para acero inoxidable AISI 316. D: burbujas de espuma de jabón

imágenes polarizadas cruzadas, de hielo policristalino que se ha tomado al 5 % de deformación a una velocidad de deformación constante. La Figura 2-3C muestran una metalografía de un acero inoxidable AISI 304. La Figura 2-3D presenta una muestra de espuma compuesta de burbujas hechas de agua y jabón. Estos cuatro ejemplos ayudan a ilustrar algunas de las características que las microestructuras comparten entre sí, así como a la mayor parte de la diversidad que puede existir. Las microestructuras pueden aparecer relativamente ordenadas o desordenadas; sus límites pueden parecer rectos o curvos, lisos o torcidos. Las microestructuras existen en escalas que podemos observar con nuestros ojos y pueden existir en escalas solo visibles a través de microscopio. Y aunque cada una de estas microestructuras tiene propiedades muy diferentes, todas las preguntas que se elaboraron antes sobre la Figura 2-2 también podemos resaltarlas sobre ellas.

Hasta ahora, todos los ejemplos han sido bidimensionales. Sin embargo, también es posible considerar microestructuras tridimensionales. La Figura 2-3D muestra una espuma tridimensional estándar de jabón y agua. Aunque la definición principal de la estructura tridimensional es muy similar a la de dos dimensiones, el paso de dos a tres dimensiones complica y enriquece significativamente este tema. La primera parte trata principalmente de microestructuras estáticas. Sin embargo, también es posible considerar las características de las microestructuras que cambian con el tiempo. Los cuadros en la Figura 2-4 muestran los resultados de una simulación de una microestructura simple que evoluciona. Este sistema particular, cambia de tal manera que disminuye lentamente la longitud total de los límites de grano. Al hacer esto, la simulación reduce gradualmente los pequeños granos hasta que desaparecen, generalmente como triángulos ligeramente redondeados. A medida que se reducen los granos, el tamaño promedio de un grano crece. Las burbujas en muchas espumas se comportan así; las células pequeñas se encogen, las células grandes crecen y con el tiempo aumenta el tamaño promedio de una burbuja. Otro sistema dinámico crítico y similar se encuentra en metales comunes y muchas cerámicas. La Figura 2-4 muestra una sección transversal bidimensional de una pieza de un policristal de óxido de zinc, cerámica, a temperatura ambiente. Cuando se dejan solos, las estructuras policristalinas evolucionan de una manera que disminuye la energía asociada con sus límites de grano. Los granos más pequeños desaparecen lentamente y con el tiempo el volumen promedio aumenta constantemente. Debido a que muchas de las propiedades de un material dependen del tamaño promedio de sus granos, sus orientaciones y otras características microestructurales, comprender cómo evolucionan estos sistemas y comprender cómo se ven estas microestructuras es crucial para una comprensión completa del sistema, así como para su diseño y mejoramiento.

2.3. Sistemas poligonales en 2D

Para comprender las características físicas que describen una microestructura, es necesario ir más allá del enfoque descrito anteriormente. Esto se ha completado con éxito para sistemas 2D, para los cuales se conocen algunas reglas topológicas comparativamente simples pero potentes. Mu-

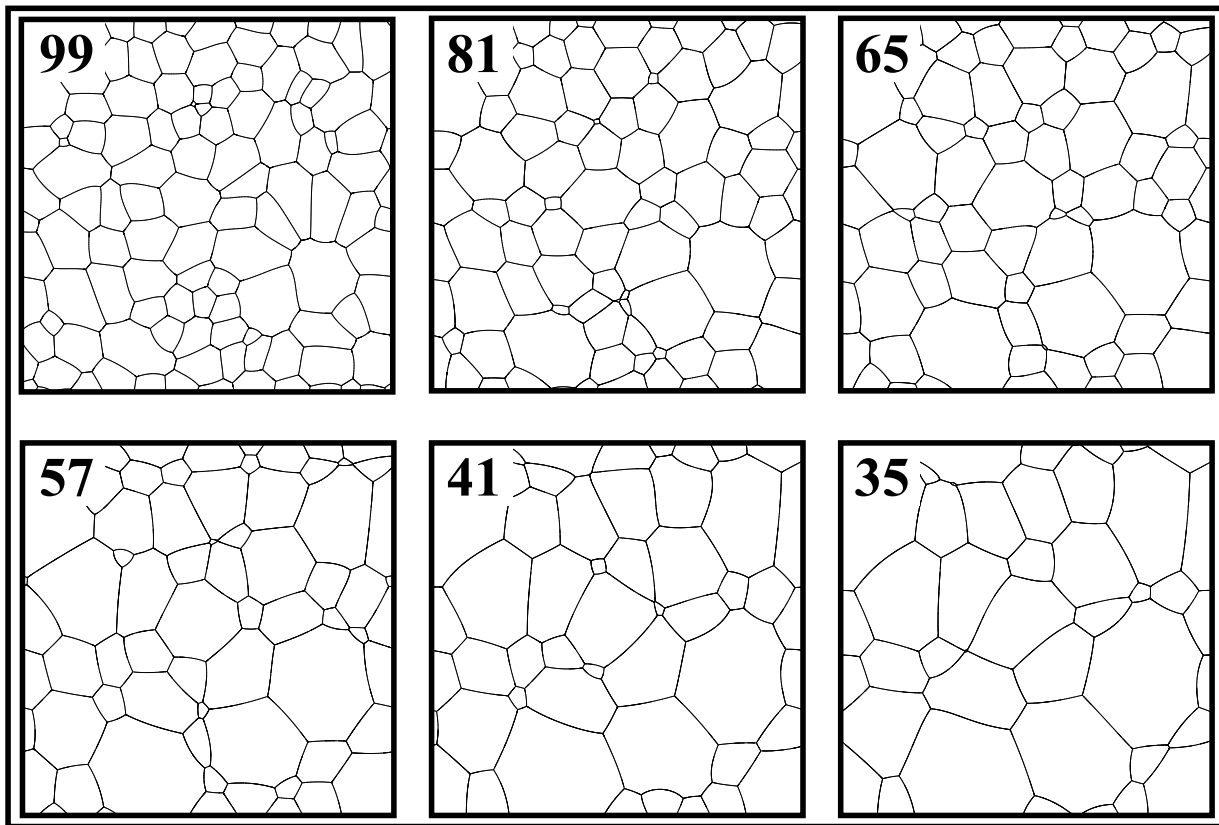


Figura 2-4.: Una microestructura evoluciona a través de un proceso de engrosamiento, en el cual las células pequeñas desaparecen y el tamaño celular promedio aumenta, de 99 a 35 granos. En el marco final, casi dos tercios de los granos han desaparecido; el área de grano promedio prácticamente se ha triplicado. Modificado de [2]

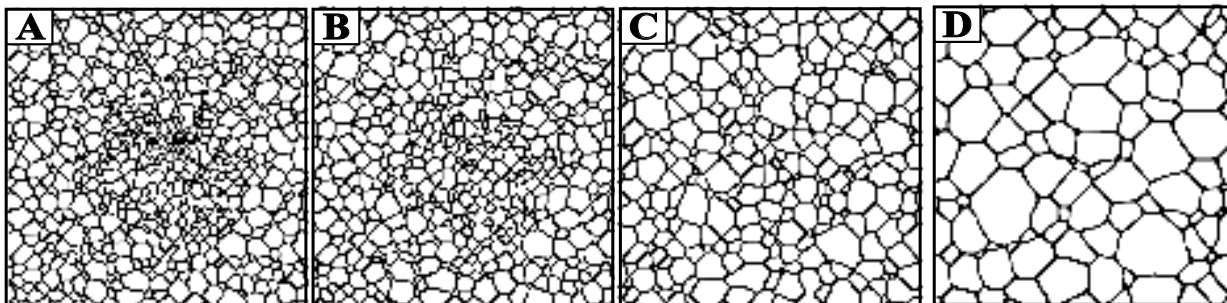


Figura 2-5.: Microfotografías (aún sin equilibrar) tomadas durante diferentes momentos de la evolución de una estructura granular en una simulación 2D del modelo de Potts mediante Monte Carlo. Los granos pequeños se encogen y desaparecen y los granos grandes se hacen más grandes, por lo que el tamaño medio de los granos aumenta como consecuencia que la energía de la GB disminuya. Fuente propia

chos de los enfoques considerados en este contexto aplican a la transformación de otros sistemas, como dominios magnéticos [48] y espumas [49]. La naturaleza de las estructuras celulares antes mencionadas, esquemáticamente ilustradas en la figura 2-5, y cómo se transforman, también es de interés no solo para la ciencia de materiales, sino también para la biología [50], geografía [51], sociología [52], e incluso la cosmología [53], y las contribuciones a la comprensión del comportamiento de este tipo de estructuras provienen de diferentes campos científicos.

2.4. Aproximaciones fenomenológicas

2.4.1. Burke & Turnbull

En uno de los primeros trabajos sobre agregados poligonales, Burke & Turnbull [54] presentaron un enfoque cinético clásico para describir un fenómeno de engrosamiento gradual. En esta derivación, la velocidad de una porción del límite de grano está relacionada con el gradiente de presión con respecto a la expresión de velocidad para el movimiento de la GB, y considerando las representaciones esquemáticas de las estructuras de granos que se muestran en la Figura 2-5, pueden entenderse como una ilustración de la superficie de una sección trasversal de una estructura policristalina (3D) o como un ejemplo de una estructura policristalina 2D. Durante el proceso de transformación del grano, algunos se contraen y desaparecen, como resultado otros crecen y el tamaño medio aumenta con el tiempo. Burke & Turnbull consideraron en su análisis como principal característica el diámetro medio, d ($\langle d \rangle$). La representación del tamaño (en 2D o 3D) se puede describir como:

$$\langle d \rangle = \sqrt{\left(\frac{\langle A \rangle}{\pi}\right)} \quad (2-1)$$

$$\langle d \rangle = \sqrt[3]{\left(\frac{6\langle V \rangle}{\pi}\right)} \quad (2-2)$$

donde $\langle V \rangle$ y $\langle A \rangle$ son el volumen medio y el área media, respectivamente. El radio se define de tal manera que $\langle r \rangle = \langle d \rangle / 2$. Burke & Turnbull establecieron un modelo para describir la cinética del crecimiento del grano, para materiales policristalinos puros, asumiendo primero que todos los límites se mueven con velocidades proporcionales a una fuerza motriz media, ΔF , de tal manera que:

$$v = m(\Delta F) \quad (2-3)$$

donde m es la movilidad de la GB. Luego, asumieron que la fuerza impulsora para el movimiento de la GB era proporcional a su energía media por unidad de área, $\langle \gamma_{gb} \rangle$ y a su curvatura media, $\langle k \rangle$, de modo que la ecuación anterior puede ser re-escrita como:

$$v = \mu \langle k \rangle \quad (2-4)$$

$$\mu = m \langle \gamma_{gb} \rangle \quad (2-5)$$

Burke & Turnbull consideraron luego que estas descripciones podían aplicar a un grano de radio r , para el cual los límites tenían una curvatura promedio $\langle k \rangle$ proporcional a $1/r$, de modo que la tasa de crecimiento del grano está dada por:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{K_1 m \langle \gamma_{gb} \rangle}{r} \quad (2-6)$$

donde K_1 es una constante y m y $\langle \gamma_{gb} \rangle$ se han tomado implícitamente como uniformes para todos los límites. Como último paso, asumieron, además, que la relación de la forma de Eq. (2-6) se aplicaba al radio de grano medio $\langle r \rangle$ para una población de granos, de modo que:

$$\langle r \rangle^2 - \langle r_0 \rangle^2 = 2K_1 m \langle \gamma_{gb} \rangle t \quad (2-7)$$

donde $\langle r_0 \rangle$ es el radio promedio del conjunto de granos en el tiempo $t = 0$. Cuando se pone en la forma de $\langle d \rangle \sim t^\alpha$, la Eq. (2-7) da $\alpha = 0,5$, suponiendo que la movilidad límite m tenía una dependencia con la temperatura tipo Arrhenius. Por lo tanto, el comportamiento ilustrado en la Figura

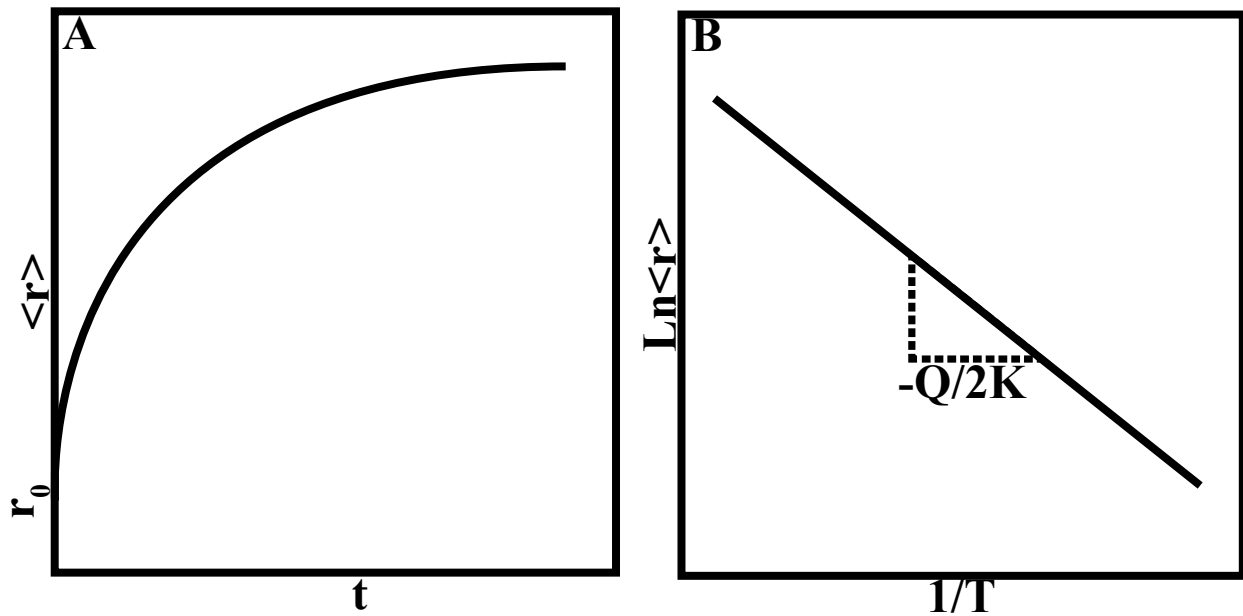


Figura 2-6.: (a) El tamaño medio del grano como una función del tiempo con el área media lineal en el tiempo. (b) La tasa de crecimiento del grano como una función de la temperatura. Modificado de Thompson [3].

2-6 se vuelve la conducta resultante esperada, donde en el caso de Figura 2-6A, $\langle r \rangle \gg \langle r_0 \rangle$. El exponente de crecimiento esperado $\alpha = 0,5$ y el comportamiento de Arrhenius ilustrado en la Figura 2-6B son consistentes con los datos de una amplia variedad de sistemas experimentales, así como para modelos más complejos. Desafortunadamente, estos resultados no implican la introducción completa de los mecanismos físicos de transformación.

2.4.2. Aplicación del teorema de Euler

Para poder caracterizar las estructuras poligonales, es necesario definir cómo las propiedades de una red de granos conectada a través de vértices, bordes y caras (2D) o poliedros (3D) se relaciona y se describe [55]. La relación de Euler permite establecer que:

$$N_{vertices} - N_{bordes} + N_{granos} - N_{poliedros} = 1 \quad (2-8)$$

En dos dimensiones, no hay poliedros, así que la relación se reduce a:

$$N_{vertices} - N_{bordes} + N_{granos} = 1 \quad (2-9)$$

donde el número promedio de lados por grano $\langle n \rangle$ en un enrejado infinito, de número de coordinación 3, donde cada vértice se comparte con tres granos y cada grano tiene $\langle n \rangle$ vértices en promedio, se puede derivar de la siguiente manera:

$$N_{vertices} = \frac{1}{3} \langle n \rangle N_{granos} \quad (2-10)$$

Cada borde es compartido por máximo dos granos, de tal manera que:

$$N_{bordes} = \frac{\langle n \rangle}{2} N_{granos} \quad (2-11)$$

Reemplazando en la ecuación de balance se obtiene la relación de Euler:

$$\frac{1}{3} \langle n \rangle N_{granos} - \frac{\langle n \rangle}{2} N_{granos} + N_{granos} = 1 \quad (2-12)$$

Que para el límite, cuando los sistemas son muy grandes, se obtiene:

$$\lim_{N_{granos} \rightarrow \infty} \frac{1}{6} \langle n \rangle = 1 \quad (2-13)$$

Entonces, el número promedio de bordes por grano es $\langle n \rangle$. En tres dimensiones hay un grado adicional de libertad, por lo que las ecuaciones son indeterminadas. Si el número promedio de caras por grano es $\langle f \rangle$ y el número promedio de lados por cara es $\langle n_f \rangle$, entonces para un policristal infinito las cantidades se relacionan como:

$$\langle n_f \rangle = 6 - \frac{12}{\langle f \rangle} \quad (2-14)$$

La relación de Euler nos da una primera aproximación a la caracterización topológica de agregados poligonales, donde el número medio de lados (una vez se ha alcanzado el equilibrio del sistema) es 6.

2.4.3. Aproximación de Lewis

En el mismo sentido, si se supone que tanto la distribución del tamaño del grano como la del número de lados (desarrollado por Euler) se mantienen auto-similares durante el proceso de transformación del grano, se puede esperar que el tamaño del grano y el número de lados estén relacio-

nados entre si. Lewis [56] fue el primero en proponer una relación de este tipo fundamentada en observaciones empíricas sobre estructuras biológicas, para las cuales se estableció que:

$$\langle a_n \rangle = \lambda(n - n_0) \quad (2-15)$$

donde $\langle a_n \rangle$ es el área promedio de la estructura celular de n-lados y λ y n_0 son constantes que deben determinarse empíricamente. Esta expresión a menudo se conoce como la ley de Lewis. Aunque no se ha proporcionado una prueba rigurosa de su validez, es una descripción aceptada. En esa dirección, Rivier & Lissowski [57] han argumentado que si la entropía de una estructura celular se define como:

$$H = - \sum_{n=1}^{\infty} g(n) \ln(g(n)) \quad (2-16)$$

donde bajo el principio de máxima entropía, requerido para que un sistema lo suficientemente grande adopte una configuración estable, se puede solucionar para H , 2-16. En este sentido, Rivier & Lissowski encontraron que cuando H se minimiza, dadas las restricciones $\sum_{n=1}^{\infty} g(n) = 1$, $\langle n \rangle = 6$, y el área total de la GB fija, $g(n)$ se definirá como una función de distribución exponencial de la forma $g(n) \propto \exp(-Cn)$, donde C es una constante. De esta manera, argumentaron que para $g(n)$, la ley de Lewis era válida.

2.4.4. Aproximación de Aboav-Weaire

Otra característica topológica derivada empíricamente para la descripción de estructuras granulares es la ley de Aboav [58]. La cual define inicialmente que las distribuciones de granos, en muestras policristalinas de MgO, pueden ser descritas como:

$$m_n = 5 + \frac{8}{n} \quad (2-17)$$

donde m_n , es el número promedio de lados de un grano. Aboav et al., analizaron posteriormente los datos de los experimentos de C.S. Smith, sobre espumas jabonosas y establecieron que:

$$m_n = (6 - a) + \frac{6a + \mu}{n} \quad (2-18)$$

Encontraron que a variaba aproximadamente entre 1-2 y que μ era el segundo momento de la

distribución de lados, el cual está dado por:

$$\mu = \sum_{n=1}^{\infty} (n-6)^2 g(n) \quad (2-19)$$

Luego, Weaire [59] argumentó que a debería ser 1. El argumento comienza con la observación que $\mu = \sum_{n=1}^{\infty} m_n n g(n)$ es el valor esperado de n^2 porque se suma el número de lados de todos los granos, n -veces. Observando que $\langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2 + \mu$ de los análisis estadísticos de sus experimentos y usando Eq. (2-16), encontraron que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} m_n n g(n) = 36 + \mu \quad (2-20)$$

Lo cual satisface la Eq.(2-19) con $a = 1$, de tal manera que:

$$m_n = (5) + \frac{6a + \mu}{n} \quad (2-21)$$

La Ecuación (2-21) se conoce como la ley de Aboav-Weaire.

2.4.5. Eventos topológicos de intercambio

En una configuración bidimensional, los agregados poligonales se transforman a través de alguno de dos únicos eventos de conmutación posibles, suponiendo que la desaparición total de la GB no es posible. En este sentido, Morral & Ashby [60] identificaron dos tipos de transiciones: el intercambio entre granos vecinos y la desaparición o aparición de un grano de tres lados. Estos cambios se indicaron como transiciones $T1$ y $T2$. El primero está relacionado con el cambio de vecinos y es representado en la figura 2-7A y el último está relacionado con la contracción del grano, como los descritos en la Figura 2-7B. Cuando se produce un evento de transformación $T1$, entran en contacto dos uniones triples, lo que da como resultado una configuración inestable, lo que produce inmediatamente la creación de una nueva frontera límite.

Cuando dos granos pierden lados, dos granos ganan lados, si y sólo si, se conserva el número de lados y la cantidad de granos. Durante los eventos de transformación $T2$, los granos desaparecen y no se conserva el número de lados pero si el número de granos. Si un grano de tres lados se desvanece, sus tres vecinos pierden un lado cada uno y, por lo tanto, un vecino sin lados cambia de clase topológica ($(n-1)$) [3]. Hay dos maneras en que un grano de cuatro lados puede desaparecer, pero en ambas formas se producen dos vecinos que pierdan un lado cada uno, y el número de lados de los otros dos vecinos permanece sin cambios [3]. La desaparición de un grano de cinco lados puede ocurrir de cinco maneras diferentes y resulta en dos vecinos que están perdiendo un lado,

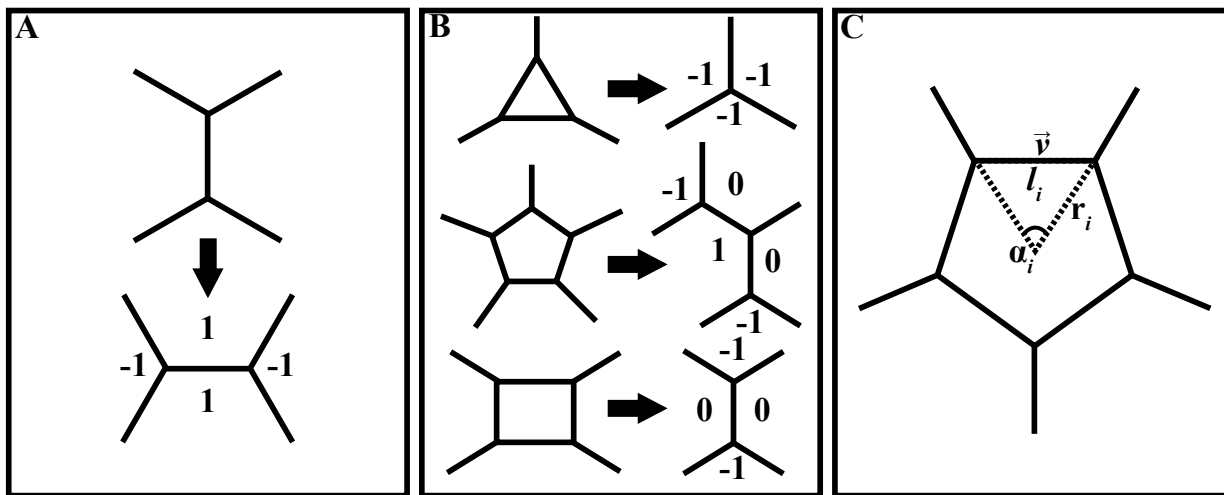


Figura 2-7.: (A) evento de conmutación topológico de tipo I. (B) eventos de conmutación topológicos de tipo II (desaparición del grano). Los números indican el cambio en el número de lados de los granos después del evento de cambio y (C) ilustración para la derivación de la ley de Mullins-von Neumann.

un vecino recibiendo un lado y dos vecinos manteniendo un número igual de lados [3]. Se espera que los granos con menos seis lados desaparezcan antes de cambiar a clases topológicas de orden inferior. Blanc & Mocellin [61] y Carnal & Mocellin [62] investigaron los efectos de la aplicación aleatoria recurrente de estas operaciones de conmutación en estructuras biológicas y caracterizaron la distribución resultante del número de lados; el valor medio fue de 6, tal y como se postuló a través de la aproximación de Euler.

2.4.6. Aproximación de von Neumann-Mullins

Al considerar las cinéticas de transformación en espumas de jabón, proceso similar al engrosamiento en agregados poligonales, von Neumann [63] derivó una relación, simple pero prominente, entre los lados de una burbuja bidimensional y la tasa de transformación de su área A_n como:

$$\frac{dA_n}{dt} = \frac{C\pi}{3}(n - 6) \quad (2-22)$$

donde C es una constante independiente de n y del tiempo. Mullins [64] luego introdujo una derivación generalizada que aplica a sistemas estructurados, para los cuales la velocidad de migración de la GB es proporcional al radio de curvatura local y en la que todas las GB se unen en un ángulo de $2\pi/3$ permitiendo determinar su estado de equilibrio termodinámico. Glazier et al., [65] definió que los resultados de von Neumann pueden derivarse considerando un grano de n -lados con GB

que se encuentran en ángulos de $2\pi/3$ (puntos triples), figura 2-7C, donde se considera el ángulo a través del cual gira un vector tangente a la GB, v , a medida que viaja a lo largo del perímetro del grano. A medida que el vector se mueve a través de un vértice, gira en $\pi/3$. Como los límites se pueden aproximar como arcos circulares, a medida que el vector se mueve a lo largo del límite i -th, gira en un ángulo $\alpha_i = l_i/R_i$ donde l_i es la longitud del arco del límite y R_i es su radio de curvatura. A medida que el vector completa un circuito a través del perímetro del grano, se encuentra que:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i + \frac{m\pi}{3} = 2\pi \quad (2-23)$$

En comparación con la evolución de las burbujas en una espuma, von-Neumann supuso que la tasa de transferencia de gas de una burbuja a otra, a través de su límite, es proporcional a la longitud del límite l_i y a la diferencia de presión a través del límite, P_i . Esta diferencia de presión, que es descrita a través de la ecuación de Laplace, es proporcional al radio de curvatura, $\Delta P_i \sim k_i = 1/R_i$, donde la tasa de cambio del área está dada por:

$$\frac{dA_n}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} C l_n k_n \quad (2-24)$$

donde C es una constante de proporcionalidad que incluye la difusividad del gas a través del límite. Una expresión equivalente para la GB, C se obtiene al reemplazar con la movilidad μ , que se define para incluir la energía límite como:

$$\frac{dA_n}{dt} = \frac{\mu\pi}{3} (n - 6) \quad (2-25)$$

donde se supone que todos los límites de la burbuja tienen la misma movilidad, en todas las direcciones. Glazier et al., [65] demostraron que el resultado dado en Eq. (2-22) se puede generalizar para burbujas con ángulos de vértices internos θ_n , no necesariamente igual a $2\pi/3$, tal que:

$$\frac{dA_n}{dt} = \frac{C\pi}{3} \frac{3n(\pi - \theta_n)}{\pi - 6} \quad (2-26)$$

2.5. Aproximaciones de campo medio

Considerando que la Eq. (2-22) es un modelo para el estudio de la transformación de un solo grano, un modelo detallado para el desarrollo de un grupo de granos que interactúan, en el que los granos desaparecen y cambian de clases topológicas, ha sido difícil de alcanzar [8–10]. En la mayoría

de los casos, se han propuesto modelos de campo medio, en los que el comportamiento de los granos individuales está influenciado por características promedio del grupo [26, 27, 66, 67]. Los objetivos de tales modelos no sólo han sido cubrir el comportamiento incorporado en $\langle d \rangle \sim t^\alpha$, sino también proporcionar una descripción de la distribución de tamaños de grano, así como, en la mayoría de los casos, descripciones de algunas características topológicas de microestructuras en transformación [3].

2.5.1. Aproximación de Hillert

Observando que durante el proceso de transformación de estructuras de recristalización, los granos grandes tienden a crecer y los granos pequeños tienden a desaparecer, Hillert [68] comenzó el desarrollo de su modelo al afirmar que la tasa promedio de crecimiento para un grano de radio r viene dada por:

$$\frac{dr}{dt} = \alpha\mu \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{r} \right) \quad (2-27)$$

donde α es una constante de proporcionalidad, $1/r$ se toma como la curvatura promedio del grano y $1/r_c$ (o k_c) es una curvatura crítica determinada de tal forma que los granos con una curvatura media mayor a k_c crecen y aquellos con menor curvatura media desaparecen. Hillert notó que para el crecimiento bidimensional del grano, esta ecuación, junto con la relación Mullins-von Nuemann (Eq. (2-22)), implicaba una relación entre los lados del grano y su radio dada por:

$$n = 6 + 6\alpha(rk_c - 1) \quad (2-28)$$

En este sentido, Abbruzzese et al., [69] desarrollaron una relación lineal, del tipo dado por Eq. (2-28), para derivar el enfoque de Hillert y presentaron evidencias experimentales para sustentar la relación con el valor medio de r dada la ecuación (2-28), Hillert desarrolló correlaciones entre el crecimiento del grano y el proceso de engrosamiento de partículas esféricas en un campo medio y, en la misma dirección de Lifshitz & Slyozov [70], empleó condiciones de continuidad para el flujo de granos, de tal manera que:

$$\frac{\partial f(r)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{dr}{dt} f(r) \right) \quad (2-29)$$

donde $f(r)$ es la distribución de tamaños de grano. Hillert luego estableció una función $f(\rho)$, con

$\rho = r/\langle r \rangle$:

$$f(\rho) = \frac{2e^\beta}{2 - \rho^{2+\beta}} \exp\left(-\frac{2\beta}{2 - \rho}\right) \quad (2-30)$$

donde $\beta = 2$ en 2D y $\beta = 3$ en 3D. Hillert, además, señaló que para $f(\rho)$ dado por la ecuación (2-30) y $\langle d \rangle \sim t^\alpha$ queda satisfecha con $\alpha = 0,5$. Hillert además indicó que para esta función, con $\langle k \rangle$ definido como la curvatura media para el conjunto de límites, $k_c = \langle k \rangle$ para el caso 2D y $k_c = 9\langle k \rangle/8$ para el caso 3D. El nuevo resultado central del modelo de Hillert fue la función de distribución de tamaños de grano dada por la ecuación (2-31). La función lognormal esta definida como:

$$f(d) = \frac{1}{\sigma d \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{\ln(d/\langle d \rangle)}{\sigma \sqrt{2}}\right)^2\right] \quad (2-31)$$

donde $\langle d \rangle$ es el valor medio y σ es la desviación estándar, permitiendo ajustar los datos de simulaciones con curvas experimentales para dar validez.

2.5.2. Aproximación de Louat

Louat [71] discutió sobre el enfoque de Hillert y sobre como el modelo no logra capturar la incertidumbre estadística del proceso de transformación del grano causado por colisiones o eventos fortuitos. Añadió que la tasa de crecimiento de un grano variaba de manera aleatoria, con los granos moviéndose aleatoriamente a través del espacio de tamaños, rotando y generando posibles mecanismos adicionales no considerados previamente, por lo que el flujo esta dado por una constante de tipo difusivo D , que se multiplica por $\partial f / \partial r$. En este caso, la ecuación de continuidad requiere que:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = D \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \quad (2-32)$$

resolviendo esta expresión para $f(0) = 0$, Louat encontró que las microestructuras seguían una función de distribución tipo Rayleigh de acuerdo con:

$$f(d, t) = \frac{2d}{\xi t^{2/3}} \exp\left(-\frac{d^2}{\xi t^{2/3}}\right) \quad (2-33)$$

donde ξ es una constante. Frost et al., [72] argumentó sobre la ruptura que la solución de Louat implicaba para conservar el volumen del sistema y también trató modelos similares para la difu-

sión en el área o el espacio del volumen. En el caso inicial, para la distribución de área de grano $f'(A, t)$ la Eq. (2-31) obedece la expresión:

$$\frac{\partial f'}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 f'}{\partial A^2} \quad (2-34)$$

La solución para f' tiene la forma:

$$f'(A, t) = \omega' A \left[\frac{\exp(-A^2/4\xi t)}{\xi t^{2/3}} \right] \quad (2-35)$$

2.5.3. Aproximación por modelos híbridos

Hunderi & Ryum [73] sugirieron por primera vez que el modelo de Hillert para el crecimiento de grano era determinista (un problema serio para describir un evento donde la aleatoriedad juega un papel importante), mientras que el modelo de Louat era completamente probabilístico, y discutieron sobre cómo el proceso de crecimiento de grano podía presentar componentes de ambos enfoques. Para ello postularon una ecuación integrada como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(D \frac{\partial f}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left(f \frac{\partial r}{\partial t} \right) \quad (2-36)$$

Pande [74] resolvió esta ecuación sustituyendo D con $D/2$, lo que produce una expresión cercana a Louat más que a Hillert

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\xi}{r} \quad (2-37)$$

2.5.4. Aproximaciones de campo medio basadas en las descripciones de von Neumann-Mullins

Otra aproximación a la construcción de una teoría de campo medio para el proceso de transformación del grano, fundada originalmente en la relación von Neumann-Mullins, puede derivarse considerando una función de distribución dependiente del tiempo para las áreas de grano y su número de lados, $f(A, n, t)$. La variación en tiempo de f es entonces:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[f \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial n} \left[f \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right) \right] \quad (2-38)$$

de tal manera que, junto con la Eq. (2-22), podemos obtener:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial A} \left[\frac{\pi\mu}{3}(n-6)f \right] + I_n \quad (2-39)$$

Teniendo en cuenta que n toma valores discretos, se describe la tasa a la que los granos de área A cambian de clase topológica a través del cambio de eventos. En este sentido, Fradkov [75] desarrolló un modelo en el cual se consideró tres tipos de eventos para un grano de n -lados: (i) cambiar a través de la pérdida de un lado de un vecino, debido a un evento de conmutación T1; (ii) cambiar a través de la ganancia de un lado de un vecino debido a un evento de conmutación T1 y (iii) cambiar a través de un evento T2, lo que implica la desaparición de un grano vecino. Además, desarrolló simulaciones en las que los granos cambiaron su área de acuerdo con el enfoque de von Neumann-Mullins y cambiaron la clase topológica de acuerdo con el modelo descrito. Encontraron un comportamiento de escalamiento consistente con $\alpha = 0,5$ y una distribución de área exponencial para el conjunto de todos los granos como:

$$f_A \left(\frac{A}{\langle A \rangle} \right) = \exp \left(-\frac{A}{\langle A \rangle} \right) \quad (2-40)$$

2.6. Desarrollos en simulación

Las aproximaciones computacionales han surgido como un sub-campo interdisciplinario que abarca la ingeniería de materiales, la física, la química y la mecánica. La investigación moderna de materiales a menudo requiere una estrecha integración entre computación y experimentos para comprender fundamentalmente la estructura y las propiedades de los materiales y su relación con la síntesis y el procesamiento. Varios métodos computacionales y herramientas en diferentes escalas espacio-temporales están ahora bien establecidas y van desde cálculos de estructura electrónica, basados en la teoría de densidad funcional, dinámica molecular y técnicas de Monte Carlo. Para aproximaciones macroscópicas, continuas, se ha implementado el método de campos de fase. En los últimos años, las actividades en el área de materiales computacionales se han ido moviendo constantemente desde el desarrollo de técnicas y estudios puramente computacionales hacia el descubrimiento y diseño de nuevos materiales guiados por computación, aprendizaje automático y minería de datos o por una combinación muy cercana de predicciones computacionales y validación experimental. Este movimiento está siendo acelerado aún más por las recientes iniciativas de varias agencias gubernamentales para perseguir la iniciativa del genoma de materiales integrada a ingeniería de materiales computacional así como las iniciativas de Big-Data. El enfoque más extenso para modelar y simular la transformación microestructural de sistemas poligonales se basa en métodos de Monte Carlo, formulado ampliamente bajo el contexto del modelo de Potts, en el que el área de un grano se divide en una serie de dominios (constituidos por nodos), cada uno

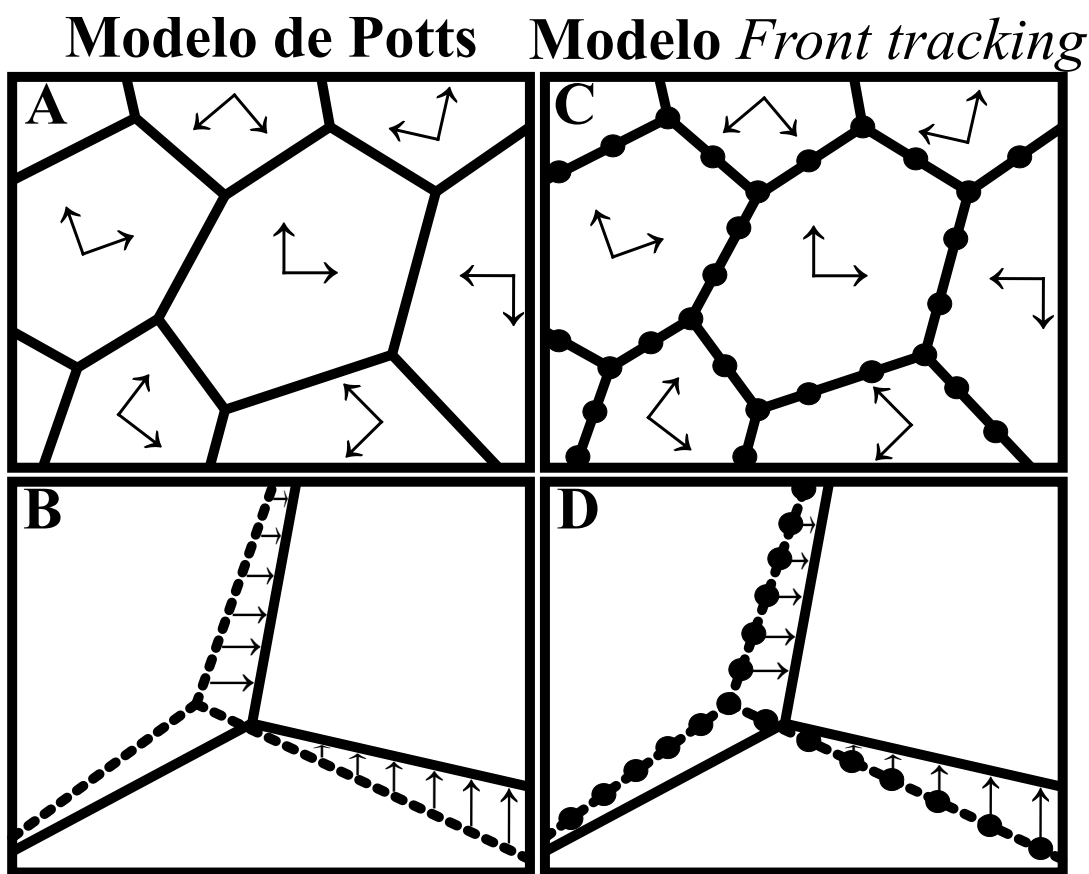


Figura 2-8.: En el modelo de Potts, el movimiento de la GB se produce cuando un límite individual cambia de identidad para minimizar las energías de interacción con los granos vecinos. En el método de seguimiento frontal, los puntos en la GB se mueven con una velocidad relacionada con la curvatura local y otras fuerzas impulsoras y los puntos en las intersecciones de la GB se mueven para mantener un equilibrio de las tensiones de la GB. Modificado de Frost & Thompson [4].

de los cuales se le atribuye un estado correspondiente (una identidad cristalográfica fundamental) definido como el ángulo de orientación entre el grano y sus estructuras vecinas; Figura 2-8.

Los límites entre dominios se consideran como GB y la migración se logra cambiando la identidad de los dominios que se encuentran conexos [26–29, 35, 76, 77]. Los dominios únicos se consideran en orden aleatorio y su estado cambia, o no, dependiendo de la energía de interacción con los dominios vecinos [20, 30, 78, 79]. Tener la misma identidad en el ángulo de orientación que los dominios vecinos produce una disminución en la energía, mientras que tener una identidad diferente da una energía mayor [80]. Luego, se permite que el dominio de grano cambie su ángulo para minimizar la energía total del sistema, así localmente la energía incrementa, con una probabilidad definida por la distribución de Boltzmann de estados probables [81]. A medida que los dominios

en la GB cambian de identidad, los límites se desplazan. Las energías del proceso son guiadas a través de un cambio de energías de interacción. Las variaciones en los efectos cinéticos, como los cambios en la movilidad de la GB, se simulan cambiando la distribución de Boltzmann que define la probabilidad de transiciones de estado, o cambiando la frecuencia con la que se tratan los estados de los dominios en los límites [26, 29, 67].

Variaciones en el enfoque de Monte Carlo permiten un continuo en los ángulos de orientación para que los centros de cada grano tengan identidades fijas. El ángulo cambia sobre algunos puntos en la GB, simulando límites difusos. Si bien esto proporciona un modelo potencialmente mejorado para estructuras de dominio magnético, su ventaja para explicar el proceso de transformación del grano no es clara, así como los mecanismos físicos de evolución, aunque indica que esta aproximación podría permitir el tratamiento de estados de estrés no homogéneos. Como opción del enfoque de Monte Carlo, las simulaciones de crecimiento de grano pueden basarse en el seguimiento de la migración de la GB, Figura 2-8C-D. Las secciones de la GB se pueden mover de acuerdo con las relaciones específicas entre la velocidad de migración del límite y las características locales, como su curvatura, el ángulo relativo entre los granos vecinos y el estado de estrés [82]. Por ejemplo, en simulaciones de crecimiento normal de grano, los nodos del límite se mueven de acuerdo con $v = \mu k$, y las uniones de la GB se mueven para mantener el equilibrio entre las tensiones. Tales enfoques de seguimiento frontal son fáciles de implementar en dos dimensiones pero sólo aluden a los mecanismos de evolución en los puntos triples. Una de las ventajas del enfoque de seguimiento frontal es que puede hacerse con relativa facilidad y puede operar a través de relaciones arbitrarias entre la curvatura local y la velocidad, lo cual es útil para describir algunos sistemas físicos.

Otro enfoque de simulación convencional, originalmente desarrollado por Fullman en 1952 y denominado como modelos VERTEX, describen la evolución de la estructuras policristalinas con respecto al movimiento de los nodos sólo en la GB, donde se encuentran tres límites en 2D, o donde cuatro límites se encuentran en 3D. Este enfoque tiene la ventaja de que cuando se implementa correctamente, se puede considerar como una aproximación a una descripción numérica completa de la migración impulsada por la curvatura [3] pero no es posible establecer un estado estacionario, pues el punto de mínima energía sería un único grano y esto es físicamente imposible. Por esta vía, hay varios resultados de simulación sobre la evolución de las espumas de jabón siguiendo el trabajo original de Weaire & Kermode [83, 84]. La imagen física descrita por estos enfoques es intrínsecamente diferente de la de transformación de grano en agregados poligonales, debido a que las películas individuales (en espumas de jabón) que dividen los dominios celulares tienen una curvatura constante en toda su extensión.

Además, se han presentado algunos modelos que no encajan adecuadamente en las denominaciones recién enumeradas. Estas abarcan simulaciones en las que se sigue la evolución de las distribuciones del tamaño de grano de un conjunto de granos, sin mantener un modelo geométrico particular [81, 85–87]. Algunos de estos enfoques incluyen una imagen en evolución de las relaciones con los vecinos. Los que no lo son, son aproximaciones numéricas de modelos analíticos.

Pocos modelos describen el proceso de transformación microestructural a través de la coalescencia de los granos en conjunto con la desaparición de la GB como resultado de las rotaciones del grano [88, 89], un proceso que por su estadística y escala a la que ocurre no se observa con frecuencia en los experimentos. Todos estos enfoques de simulación dan como resultado un comportamiento que corresponde con $\alpha = 0,5$. También, se encuentra el enfoque de Aboav-Weaire dado en la ecuación Eq. (2-21), donde el área media de los granos de n-lados satisface la ley de von Neumann-Mullins. Todos los resultados de las simulaciones parecen evolucionar a un comportamiento de estado estable idéntico, lo que resulta en un tamaño de grano normalizado, invariante en el tiempo y con distribuciones de número de lados similares.

2.7. Desarrollos experimentales

Contrario a lo que se ha logrado en metales y/o cerámicos (o minerales), amplios experimentos sobre el proceso de evolución en espumas de jabón [90, 91] han permitido establecer que la transformación se logra mediante el desplazamiento de los límites del dominio a velocidades proporcionales a su curvatura y mediante la desaparición de los dominios, lo que tiene como consecuencia un aumento en el tamaño medio del dominio. En esta dirección Glazier, Stavans & colaboradores han implementado estudios del proceso, sobre espumas entre placas de vidrio. Se demostró que para este sistema y bajo condiciones experimentales apropiadas, se observa un comportamiento de estado estable para el cual μ obtiene un valor constante y en este régimen, se cumple la ley Aboav-Wearie (Eq. (2-21)), el área media de la célula de n-lados sigue la relación de von Neumann-Mullins y se satisface $\alpha = 0,5$, obteniéndose distribuciones de lados y tamaño de grano normalizadas e invariantes en el tiempo. Estos patrones de conducta, se tornan en el punto de comparación de los nuevos enfoques y aproximaciones.

2.8. Sistemas 3D

Los enfoques y desarrollos en modelos matemáticos para la transformación de agregados poligonales es un campo de interés incremental, pero aún los modelos no están completos. Los resultados de las simulaciones para el crecimiento idealizado sugieren que la física y la matemática del proceso parecen estar entendidas pero no introducidas a los algoritmos, ya que los diferentes enfoques de simulación dan lugar a un comportamiento similar y es similar a sistemas experimentales (por ejemplo espumas), pero esto sólo ocurre para este caso particular. Estos desarrollos teóricos pueden extenderse para evaluar el efecto de las suposiciones hechas en sistemas idealizados (como la uniformidad de las movilidades de las GB, la tasa de crecimiento de grano y las energías asociadas) y para tratar la fenomenología que surge de las impurezas, aspectos topológicos de intercambio y los efectos superficiales en sistemas policristalinos y sistemas polifásicos. Los enfoques y desa-

rrillos en el modelado y las simulaciones para sistemas 3D no han logrado todo el éxito obtenido por las simulaciones 2D y los resultados experimentales, incluidos los sistemas simples (espumas) [92–94].

2.8.1. Modelamiento de sistemas 3D

En esta vía, los modelos de campo medio de Hillert y Louat y los modelos detallados establecidos en combinaciones de éstos enfoques pueden implementarse para describir las etapas de transformación de estructuras granulares. De hecho, se han desarrollaron para explicar los resultados experimentales en sistemas constituidos por jabón. Sin embargo, el análisis de Hillert arroja una distribución de tamaño de grano con un corte definido en un tamaño de grano máximo y con una forma que no coincide con los datos experimentales, Figura 2-9. El análisis de Louat puede reproducir distribuciones de tamaño de grano de acuerdo con los resultados experimentales, pero esta consistencia aparente puede adquirirse incluso con suposiciones subyacentes que varían significativamente, por lo que no constituye evidencia que respalde este enfoque. Como se mencionó anteriormente, para el caso de dos dimensiones, es posible que una descripción completa de la transformación de las estructuras de grano deba tener en cuenta la tasa de cambio de los volúmenes de grano en función de la clase topológica. Esto significa que se debe considerar la función por la cual la cantidad de caras de grano entran y salen de las clases topológicas. En 2D, se analiza a través de la relación von Neumann-Mullins pero el último se puede argumentar aproximadamente debido al número relativamente restringido de posibles transiciones. Al considerar la topología de las estructuras de grano en 3D, es útil, para empezar, la ley de Euler que para tres dimensiones proporciona:

$$-C + F - E + V = 1 \quad (2-41)$$

donde C es el número de celdas o granos, F el número de caras, E es el número de bordes y V es el número de vértices. De esto se puede demostrar que:

$$\langle f \rangle = \frac{12}{6 - \langle e \rangle} \quad (2-42)$$

donde $\langle f \rangle$ y $\langle e \rangle$ son los números promedio de caras y bordes por grano, respectivamente. Ya, este resultado muestra la complejidad elevada de los sistemas 3D. La comparación con el resultado equivalente en 2D demuestra que las microestructuras en 3D tienen un grado más de libertad en las características topológicas. Empíricamente, $\langle f \rangle \sim 14$, aunque esta relación no es exacta porque no hay un poliedro regular con caras planas que llenen el espacio [3]. La descripción más cercana a un sólido geométrico de este tipo es un tipo de tetrakaidecaedro distorsionado, que llena el espacio

cuando se coloca en una red BCC, formando la célula de Wigner-Seitz. Apoyado por la hipótesis de máxima entropía, River [95] postuló que:

$$\frac{d\nu_f}{dt} \propto (f - \langle f \rangle) \quad (2-43)$$

donde ν_f es el volumen promedio de granos con f caras y $\langle f \rangle$ es el número promedio de caras para todos los granos. Glazier [96] más tarde usó simulación 3D para establecer que:

$$\frac{d\nu_f}{dt} \propto (\nu_f)^{1/3} (f - f_0) \quad (2-44)$$

donde f_0 era alrededor de 16 y diferenciable de $\langle f \rangle$, que obtuvo un valor de 13, en el que el factor $(\nu_f)^{1/3}$ se requiere para la constante de proporcionalidad y para obtener las mismas unidades que la movilidad del sistema. Weaire & Glazier [97] han derivado una relación entre f_0 y $\langle f \rangle$ en términos del segundo momento de la distribución y del número de caras

$$f_0 = \langle f \rangle \left(1 + \frac{\mu_2}{\langle f \rangle^2} \right) \quad (2-45)$$

Donde la ecuación (2-45) es una expresión similar o análoga en 3D para la relación von Neumann-Mullins con una constante de proporcionalidad que se escala con la movilidad de la GB. No obstante, es imperativo tener en cuenta que, si bien la aproximación de von Neumann-Mullins se aplica a un grano individual y se ha demostrado rigurosamente. La Eq. (2-45), por otro lado, se aplica a conjuntos de grano y es en gran parte empírica. Teniendo en cuenta las transiciones topológicas descritas anteriormente, hay dos tipos de eventos de conmutación en 3D, una vez más en analogía con el caso 2D, procesos T1, en los que dos vértices se combinan para crear una nueva cara y procesos T2, en los que los granos desaparecen directamente [3]. Sin embargo, en tres dimensiones, hay un gran número de tipos diferentes de eventos que no mantienen el número total de caras. En las búsquedas realizadas hasta la fecha, los únicos enfoques para desarrollar un modelo de campo medio en 3D que intentan explicar la transformación del volumen pero sin clases topológicas, así como transiciones entre clases topológicas (en analogía con los trabajos de Fradkov [75] han sido realizados por Zollner et al., [28, 98–100].

2.8.2. Simulación de sistemas 3D

Como ya se mencionó, los modelos de Monte Carlo (y sus variaciones) se han utilizado para simular el proceso de transformación de estructuras granulares en 2D y 3D [77, 98, 100–108]. Y se ha demostrado que se puede alcanzar un estado de escalado para el cual se satisface $\alpha = 0,48$. Las

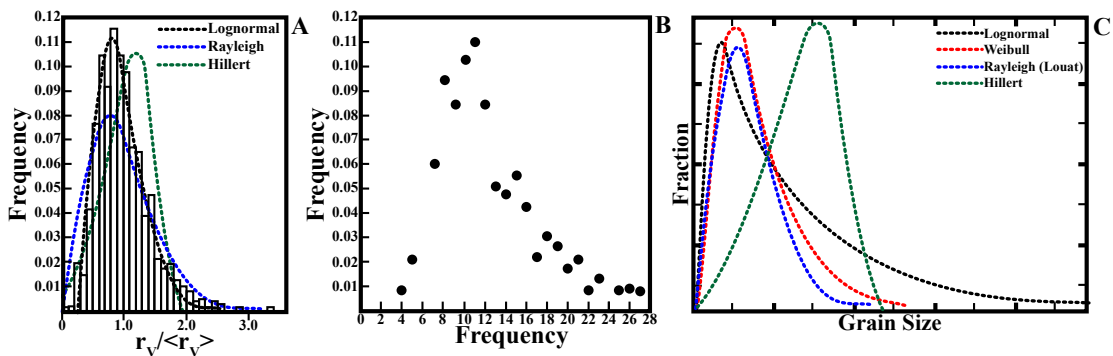


Figura 2-9.: (A) Distribución de Rayleigh (punto azul punteado), lognormal (punto negro punteado) y Hillert (punto verde punteado). (B) Distribuciones de número de caras para el crecimiento de grano normal en 3D y (C) Funciones de distribución de tamaño de grano propuestas: Lognormal (línea negra de puntos y rayas), Weibull (línea roja de puntos y rayas), Rayleigh (punto azul - línea de puntos); y la función propuesta por Hillert (línea verde de puntos y rayas) para el crecimiento de grano normal en 2D. Modificado de Anderson et al., [5]

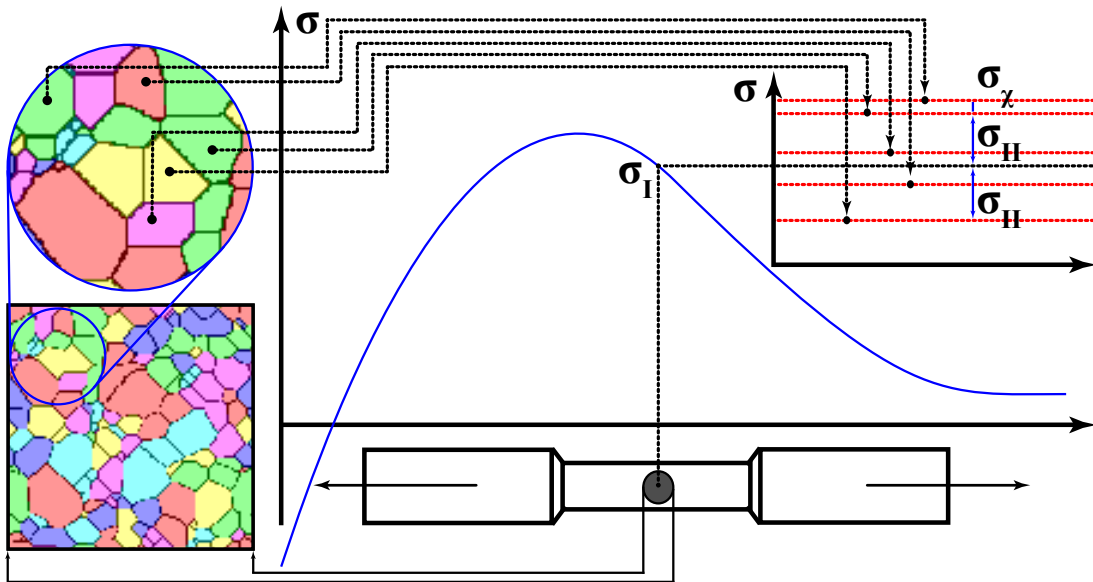


Figura 2-10.: Esquema de las tensiones internas en un agregado policristalino. Los diferentes colores denotan diferentes orientaciones cristalográficas. Las tensiones internas se pueden clasificar según la longitud característica sobre la cual se auto-equilibran. El estrés macroscópico (σ_I) es el estrés medio en una región relativamente grande que incluye un número significativo de granos. Dentro de un grano, las tensiones de segundo orden (σ_{II}) y tercer orden σ_χ pueden ser apreciadas. Fuente propia

distribuciones de tamaño de grano se han calculado y se muestran en la Figura 2-9C. En los resultados experimentales, es bastante común definir la distribución de los radios de grano (o diámetros) de cortes 2D a través de estructuras 3D. Los resultados de los experimentos y los datos de la simulación coinciden parcialmente, pero no muestran la misma calidad que se puede encontrar en los sistemas 2D. Esto podría deberse, en parte, al hecho que los resultados del experimento se llevaron a cabo en muestras policristalinas reales, en las que aplican no idealidades. Barrales-Mora et al. [109], desarrolló un modelo VERTEX-3D que incluía efectos de curvatura de la interfaz y encontró que los resultados de las simulaciones encajan con los resultados obtenidos con el modelo de Potts. Syha & Weygand [110] también desarrollaron modelos de dinámica VERTEX generalizado para el crecimiento de grano en tres dimensiones que también coincide con los resultados de los modelos 3D de Potts, incluido el resultado dado en la ecuación (2-45). También se han desarrollado e introducido simulaciones de rastreo frontal en 3D, en las cuales las GB están teseladas con triángulos regulares y las uniones triples en los vértices se transforman con velocidades proporcionales a la curvatura local (desarrollos en un software denominado Surface Evolver) para predecir el comportamiento [111–114].

2.9. Influencia del tamaño en las propiedades mecánicas del agregado

Como se puede apreciar en la Figura 2-10, la influencia de características microestructurales como la forma, el tamaño del grano, su vecindario local y su distribución sobre las propiedades mecánicas del agregados, convencionalmente se ha abordado a través de una serie de ecuaciones fenomenológicas constitutivas que tienen la forma **Hall-Petch**. De manera general y en un rango de tamaños estándar, los valores de las propiedades mecánicas típicas aumentan con el inverso de la raíz del tamaño de grano. La ecuación de Hall-Petch relaciona la resistencia última del sistema con el tamaño medio de grano de la siguiente manera:

$$\sigma_y = \sigma_0 + \kappa_y \frac{1}{\sqrt{\langle d \rangle}} \quad (2-46)$$

donde el primer término σ_0 caracteriza la resistencia promedio al movimiento de las dislocaciones en el cuerpo del grano y el coeficiente κ_y caracteriza la resistencia a la transferencia de procesos de deslizamiento a través de la GB y $\langle d \rangle$ es el diámetro medio del grano. También, una especie de relación similar es válida para la dureza de un sistema, medida a través de procesos de indentación [115–119]. De la misma manera, una ecuación análoga se aplica a la tensión por fractura en

agregados policristalinos de alta resistencia [120] como:

$$\sigma_f = \kappa_f \frac{1}{\sqrt{\langle d \rangle}} \quad (2-47)$$

Formas Hall-Petch también suelen ser útiles para estudiar la temperatura de transición dúctil-frágil [121]

$$T_{DB} = T_0 + \kappa_{DB} \frac{1}{\sqrt{\langle d \rangle}} \quad (2-48)$$

Es bastante común que la resistencia a la fatiga de un material se tome como una función que varía con el tamaño de grano [122–124]. La relevancia en diferentes campos de la relación genérica de Hall-Petch la convierte en una de las relaciones constitutivas más prominentes y sin duda una de las más comunes. Sin embargo, sus orígenes fundamentales e incluso su significado físico preciso aún es materia de derivación. Por ejemplo, cuatro enfoques distintos han avanzado en la misma vía que la ecuación (2-46), cada uno de los cuales tiene, al menos, un par de modificaciones particulares y se han desarrollado al menos tres modelos diferentes para explicar las desviaciones del comportamiento de Hall-Petch en granos muy pequeños. La dependencia del tamaño de grano con el estrés para estudiar el deslizamiento de planos cristalográficos es una consecuencia directa de los criterios de fractura de Griffith [125], pero la relación Hall-Petch para la transición dúctil-frágil presume una linealidad entre la tensión de fractura y T_{DB} que es más difícil de justificar. Incluso dados los modelos teóricos y computacionales sobre la relación Hall-Petch, aún hay algunas ambigüedades sobre cómo introducir información estructural [126–131]. Especialmente en aceros martensíticos, el significado del tamaño de grano no es simple de definir [132]. De hecho, diferentes medidas del tamaño de grano controlan diversos procesos; en algunos casos, el enfoque de refinamiento de grano que produce mejoras notorias en la resistencia al clivaje [132, 133], sin embargo puede llegar a reducir la dureza [133–135]. El uso del tamaño de grano medio como la característica principal de la distribución también es difícil de justificar a la luz de las aproximaciones fenomenológicas, ya que el rendimiento y la resistencia generalmente reflejan el comportamiento de los enlaces más débiles y éstos se asocian con los valores extremos en la curva distribución.

2.9.1. Influencia en la resistencia

Existen cuatro modelos, conceptualmente diferentes, que resultan de un enfoque de Hall-Petch para la evaluar la resistencia de un material desde el enfoque microestructural: (i) El primero, y el más comúnmente citado es el modelo de acumulación de dislocaciones [120, 136]. Si tenemos una distribución de dislocaciones que se acumulan contra una GB bajo, una tensión de cizalla efectiva, entonces $\tau_e = (\tau - \tau_i)$ donde τ es la tensión aplicada y τ_i es la corrección local debido

a la fricción y las tensiones secundarias. Se puede mostrar que la tensión en la parte delantera del apilamiento será $\tau_p = \eta\tau_e$. Si el apilamiento tiene una longitud, L , la cantidad de dislocaciones que incluye también estará determinada por el estrés efectivo, esto es $\eta = (q\pi L\tau_e)/GB$ donde G es el módulo de corte, b es el vector de Burgers y q es un factor geométrico ~ 1 . La longitud, L , no puede ser mayor que el tamaño del grano, $\langle d \rangle$, y generalmente se toma como $\langle d/2 \rangle$. Se supone que la resistencia se produce cuando la tensión efectiva de la acumulación, τ_p , se eleva a un valor crítico, es decir, el valor necesario para nuclear un proceso de deslizamiento a través de la GB, en este punto se tiene:

$$\tau = \tau_y = \tau_i + \sqrt{\frac{2Gb\tau_c}{q\pi\langle d \rangle}} \quad (2-49)$$

Si en la Eq. (2-49) se multiplica por el factor de Taylor, m , para convertir τ_y en la resistencia a la tracción σ_y , la Eq. (2-49) toma la forma de la Eq. (2-46). (ii) Si bien el modelo de acumulación es bastante común y aplicable, tiene la desventaja que las acumulaciones bien definidas son difíciles de observar y medir experimentalmente [137–139]. Por lo tanto, es importante analizar que la aproximación de Hall-Petch podría derivarse de una física más general, basada adicionalmente en el estrés desarrollado a través de la estructura de grano [140]. Desde esta perspectiva, un plano deslizado actúa bastante similar a una grieta de corte que produce un campo de tensión de punta de grieta como:

$$\tau_r = (\tau - \tau_i)q \left(\frac{d}{r} \right)^{1/2} \quad (2-50)$$

donde r es la distancia desde la punta de la grieta y q es un factor de orden ~ 1 que depende de los detalles del proceso. Suponiendo que el esfuerzo de cedencia (*yield*) aumenta cuando el estrés incrementa por encima de un valor crítico, τ_c , a cierta distancia, r_c , antes del límite de cedencia, obtenemos la ecuación de Hall-Petch en la forma:

$$\tau_y = \tau_i + \tau_r r_r \left(\frac{1}{\langle d \rangle} \right)^{1/2} \quad (2-51)$$

(iii) Una tercera aproximación se basa en la correlación entre el tamaño de grano y la densidad de dislocaciones [141–146]. En los modelos de endurecimiento básico, la tensión cortante crítica para mover una dislocación varía con la densidad de dislocaciones ρ , como:

$$\tau_c = \tau_i + \alpha Gb\sqrt{\rho} \quad (2-52)$$

donde α es un factor en el rango 0,1 – 0,3 [142]. La evidencia sugiere que esta ley de endurecimiento esencial se aplica ampliamente a la deformación de metales policristalinos [145, 146], a

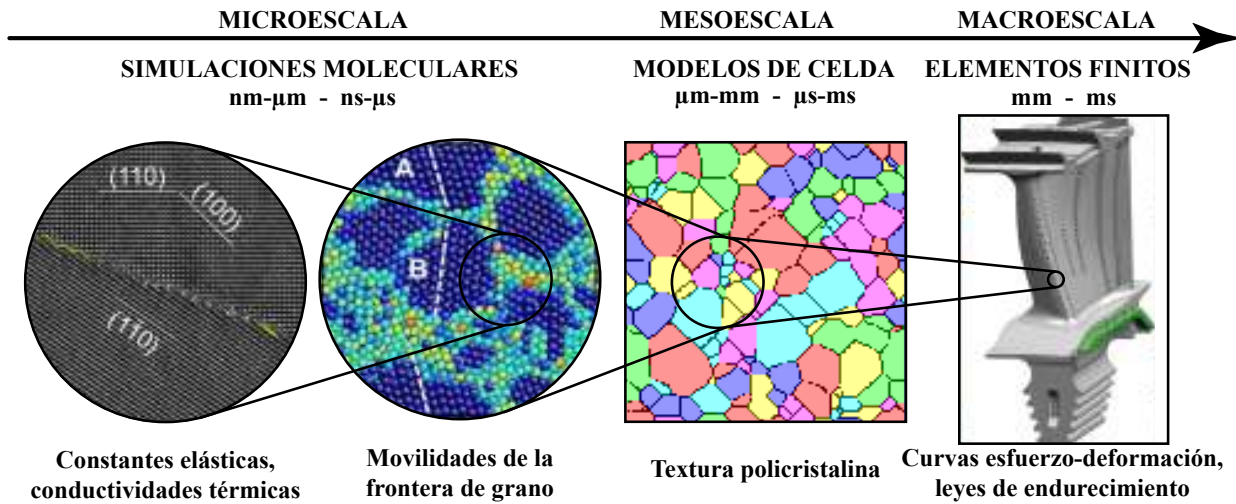


Figura 2-11.: Los agregados poligonales tienen una microestructura compuesta de cristales simples y GB. El comportamiento térmico y mecánico de la MP depende en gran medida de su microestructura, donde la textura (tamaños y orientaciones) de los cristales individuales y el área total de GB desempeñan un papel fundamental. Fuente propia

partir del límite de elasticidad. Esto implica que la densidad de dislocaciones debe ser determinada por el inverso del tamaño de grano de acuerdo con:

$$\rho_y = \left(\frac{\kappa_y}{\alpha G b} \right)^2 \frac{1}{\langle d \rangle} \quad (2-53)$$

Se han sugerido dos explicaciones diferentes para justificar comportamientos como los de la ecuación (2-53). El primero es un enfoque más antiguo atribuido a Li [147, 148] quien sugirió que la densidad de dislocaciones dentro del grano podría ser determinada por fuentes ubicadas en la GB. Si estas fuentes se relacionan con una densidad de área constante, algunas dislocaciones dentro del grano serían proporcionales al área de la GB, cd^2 , donde c es una constante que depende de la forma del grano como $\rho = N/V = cd^2/\langle d \rangle^3 = c/d$. Las explicaciones más recientes se han basado en la distribución de dislocaciones geoméricamente necesarias (GND) que se requieren para asegurar una tensión compatible en la GB [149–154]. La cantidad de GND necesarias para adaptarse a una orientación dada a través de la GB es proporcional al área del límite. Por lo tanto, la cantidad esperada de GND dentro de un grano de tamaño $\langle d \rangle$, después de una deformación dada debería ser proporcional al área de la GB, nuevamente dando una densidad de dislocaciones que aumenta con el inverso del tamaño de grano. Y (iv) una cuarta fuente de comportamiento Hall-Petch se encuentra en las estadísticas de la resistencia microestructural al deslizamiento de GB [155–158].

Los mecanismos convencionales de endurecimiento en masa (endurecimiento de soluto, endureci-

miento por dislocación, endurecimiento por precipitación) a menudo se pueden modelar mediante un proceso en el que las dislocaciones se deslizan a través de un campo de barreras distribuidas al azar. La ley de endurecimiento básico es un ejemplo; la densidad de dislocaciones define los obstáculos para deslizarse. En un caso real, una dislocación que se desliza a través de un grano tiene una longitud finita que es del orden del tamaño de la GB. Tanto el análisis teórico como las simulaciones sugieren que el estrés requerido para mover una dislocación a través de un plano de ancho, $\langle d \rangle$, que contiene una distribución de obstáculos discretos, aumenta como $\langle d \rangle^{-1/2}$, como en Hall-Petch. La razón principal, en este caso, es estadística. A medida que el ancho de la matriz disminuye, se vuelve más fácil encontrar configuraciones de obstáculos que son anormalmente fuertes en su resistencia. Los estudios de simulación [157, 158] sobre el movimiento de dislocaciones individuales a través de matrices cuadradas de obstáculos fijos dan como resultado:

$$\tau_c = \tau_0 + \left(\frac{\kappa_\beta G b}{\sqrt{l_s}} \right) \frac{1}{\sqrt{\langle d \rangle}} \quad (2-54)$$

donde τ es la tensión de línea de la dislocación, l_s es el espaciado medio entre obstáculos discretos y κ_β es una constante que depende de la resistencia de la barrera. Cabe señalar que los modelos descritos acá no son mutuamente excluyentes. Pueden aplicarse simultáneamente y contribuir conjuntamente a los fenómenos de Hall-Petch. Además, todos los modelos predicen una pendiente Hall-Petch que es proporcional al módulo elástico, la gran dificultad de todas las aproximaciones es introducir adecuadamente el valor de $\langle d \rangle$ en las ecuaciones.

2.9.2. Hall-Petch y la resistencia en agregados poligonales

Selección del tamaño de grano

El problema para la aplicación de la aproximación clásica de Hall-Petch, la cual incluye la medida del tamaño de grano así como la forma de usar el tamaño medio de grano y el posible desglose de la ecuación es cuando el tamaño de grano se refina. Si bien los diferentes modelos descritos conducen a una relación Hall-Petch de la forma clásica, difieren en la medida apropiada del tamaño de grano y de sus características, particularmente cuando los granos son de forma irregular. La acumulación de dislocaciones y los modelos de deslizamiento se basan en la longitud del plano de deslizamiento activo y, por lo tanto, utilizarían la medida del tamaño de grano que determina la trayectoria libre media para el deslizamiento. En el caso de formas de grano irregulares (agregados poligonales), esta debe ser la longitud promedio del plano de deslizamiento principal a lo largo del grano. El modelo de densidad de dislocaciones relaciona la fuerza con el área de la GB por unidad de volumen y utiliza una medida conocida como diámetro de grano efectivo y el modelo estadístico medirá el tamaño del grano como el ancho perpendicular a la dirección del deslizamiento.

Tamaño medio de grano

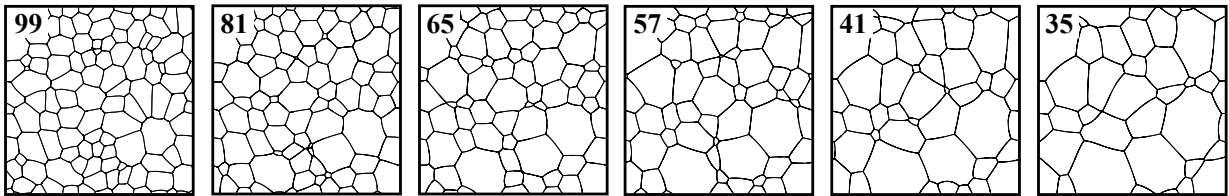
Dado que un material poligonal se fragiliza inevitablemente en su elemento más débil, puede parecer inapropiado utilizar el tamaño de grano medio como la variable constitutiva en la relación Hall-Petch o cualquier otra aproximación mecánica. Una medida del grupo de granos menos favorables sería más apropiada. Sin embargo, si el conjunto de muestras que se utilizan para probar el tipo de relaciones Hall-Petch tienen características que son geoméricamente similares, eso significa que tienen distribuciones de tamaños y formas de grano normalizadas similares entonces, y solo entonces, el tamaño de grano medio será una medida adecuada, lo que ocurre cuando el material no ha sido sometido a ningún proceso de deformación. Cualquiera que sea el tamaño o la distribución, quien controla el mecanismo de cedencia para microestructuras geoméricamente similares escala con el inverso del tamaño promedio [129, 159–161]. Si el tamaño medio es un parámetro de escala, en lugar de una variable mecanicista directa, el valor exacto de la pendiente Hall-Petch cambiará junto con la resistencia del material, y las estrategias de simulación podrían hacer seguimiento del proceso, afectadas por las características morfológicas de la microestructura. Los materiales con distribuciones de tamaño muy diferentes obedecerán desviaciones ligeras la forma de la relación Hall-Petch. Este problema de aproximación ha sido estudiado por Kurzydowski et al., [162], quien utilizó metalurgia de polvos para hacer muestras de aluminio con diferentes distribuciones de tamaño y por Sanders et al., & Cheng et al. [163], quienes estudiarón el comportamiento de muestras de cobre y paladio de grano ultra-fino en función de los parámetros de procesamiento. Ambos encontraron que las muestras con microestructuras geoméricamente diferentes tienen respuestas significativamente diferentes a los cambios en el tamaño de grano medio. Como se esperaba acerca de estos resultados, para valores dados, las muestras con distribuciones de tamaño relativamente extendidas y, por lo tanto, poblaciones relativamente grandes de granos mayores que el promedio, fueron más suaves que aquellas con distribuciones de tamaño de grano estrechas pero con el mismo tamaño de grano medio.

Desviaciones de la conducta Hall-Petch

Cualquiera que sea el mecanismo que impulsa la relación Hall-Petch, debe haber un tamaño de grano en el que deje de aplicarse, Figura 2-11. La investigación en una variedad de materiales, incluidos aceros, sugiere que este límite de grano medio cae a un tamaño de aproximadamente 20 nm. El refinamiento del tamaño más allá de este punto no suele producir una mayor resistencia, e incluso puede llevar a un comportamiento de Hall-Petch inverso en el que la resistencia disminuye directamente con el tamaño más fino [126, 164–167]. Se han lanzado al menos tres hipótesis probables para explicar el límite de grano pequeño de la relación Hall-Petch: (i) comúnmente se acepta que cuando el tamaño se vuelve lo suficientemente pequeño, el mecanismo de deformación dominante cambiará de deslizamiento trans-granular a deslizamiento por la GB, por lo que la relación Hall-Petch ya no aplica [168, 169]. Si bien no conocemos evidencia experimental directa, esta hipótesis

está respaldada por simulaciones recientes de deformación en sistemas ultra-finos [170, 171]. Sin embargo, de estas simulaciones no queda claro que el deslizamiento de la GB podría llegar a ser dominante [171]; *(ii)* los granos lo suficientemente pequeños no podrían soportar distribuciones de dislocaciones, por lo que los mecanismos de acumulación de dislocaciones no terminan de aplicarse. Recientemente se ha publicado un trabajo experimental pertinente en el que se estudia la dureza de películas delgadas, utilizando microscopía electrónica de transmisión para monitorear las distribuciones de dislocaciones [172, 173]. Encontraron que el comportamiento de Hall-Petch en varios sistemas presentaban desviaciones significativas. El cambio en el comportamiento se produjo aproximadamente en el tamaño en el que el contenido máximo de dislocaciones en los granos se redujo a la mitad. Cabe señalar, sin embargo, que la geometría de sus muestras no era propicia para el deslizamiento de GB y *(iii)* no hay una manera simple de fabricar muestras policristalinas de grano ultra-fino y existe un riesgo particular que las muestras que se comparan para probar la relación Hall-Petch puedan diferir cualitativamente en importantes características geométricas de sus microestructuras. Si la pendiente de Hall-Petch es sensible a la microestructura, como parece estar en al menos la mayoría de los sistemas, entonces las diferencias microestructurales pueden producir desviaciones de la ley.

3. SIMULACIÓN DE MICROESTRUCTURAS POLIGONALES



Muchos sistemas físicos pueden modelarse como grandes conjuntos de dominios, unidos a lo largo de los límites: los sistemas biológicos se encuentran a lo largo de las paredes celulares, las bombas de jabón se encuentran a lo largo de películas delgadas, los países se encuentran a lo largo de los límites geopolíticos y los cristales de estructuras poligonales se encuentran a lo largo de las intercaras de grano. Cada clase de estructuras resulta de una compleja interacción de condiciones iniciales y dinámicas evolutivas particulares. La microestructura estadística en estado estable que resulta del crecimiento de grano isotrópico, de sistemas policristalinos, es canónica; es decir, es el ejemplo más simple de una estructura celular que resulta del gradiente de flujo de energía, lo que es directamente proporcional a la longitud total, o área, de todas las fronteras de grano. Como muchas de las propiedades de los materiales policristalinos dependen de su microestructura subyacente, una comprensión más completa del estado estacionario de crecimiento de grano puede proporcionar información sobre la física de una amplia gama de materiales cotidianos. En este capítulo presentamos las estructuras de simulación que permiten definir las características geométricas y topológicas de estas microestructuras canónicas, de estado estable, obtenidas a través de simulaciones extensas de crecimiento de grano isotrópico.

3.1. Propiedades geométricas y topológicas de estructuras canónicas

Una estructura poligonal es un conjunto de cristales individuales o granos unidos a lo largo de límites de grano. Las estructuras poligonales se forman generalmente durante la solidificación del material y continúan evolucionando posteriormente mediante procesos tales como el crecimiento del grano y re-cristalización. La mayoría de metales, algunos cerámicos y semiconductores de uso común son estructuras poligonales o sistemas policristalinos. Quizás la clase más común de estructuras poligonales es la que resulta del crecimiento normal del grano. Este es un proceso en el que los límites migran con una velocidad proporcional a su curvatura media, lo que lleva a una disminución monotónica del área del límite de grano y de la energía del sistema, así como un aumento monotónico en el tamaño de grano medio. La idealización habitual es que la energía y la movilidad del límite del grano son isotrópicas y constantes. Se ha observado que el crecimiento normal del grano conduce a la evolución de las estructuras, mostrando un estado estable estadístico, donde las distribuciones de las propiedades geométricas y topológicas permanecen invariables a medida que aumenta el tamaño medio de grano. En muchos casos experimentales reales, esta imagen se complica por la anisotropía y la presencia de solutos o fases adicionales. No obstante, las estructuras isotrópicas de crecimiento de grano normal son quizás las más genéricas de todas los sistemas policristalinos; la simplicidad del crecimiento de grano en el límite isotrópico y la ubicuidad de la estructura producida significa que el crecimiento de grano normal puede considerarse como el oscilador armónico de las estructuras poligonales.

La caracterización experimental de las estructuras de estado estable es un desafío debido a la dificultad inherente para explorar la geometría y la topología de los granos. Se han realizado varios estudios de este tipo, entre otros, mediante la fragilidad de los límites del grano y posteriormente la separación de los granos individuales [174], mediante el corte en serie [20, 175] y, más recientemente, mediante técnicas de difracción basadas en sincrotrón [176]. Debido a las dificultades para caracterizar experimentalmente las microestructuras que consisten en grandes cantidades de granos, y al hecho de que la movilidad y la energía de los límites de los granos isotrópicos son poco frecuentes, las simulaciones proporcionan un método preferido para investigar las estructuras de crecimiento de granos normales e isotrópicas. El propósito principal de este capítulo es proporcionar un método efectivo para el diseño y la caracterización completa de las características geométricas y topológicas de estructuras de crecimiento de grano isotrópico bidimensional, así como la forma para obtener las correlaciones entre dichas características. Para este fin, utilizamos una técnica de simulación convencional para generar bases de datos de estructuras de crecimiento de grano isotrópico en estado estable, luego de esto, el esquema computacional se modifica para tener control sobre las características, estableciendo una plataforma de diseño [174, 177–180]. Nuestra caracterización geométrica y topológica proporciona un conjunto de datos rigurosos y fundamentales con los que se pueden comparar y poner a prueba estructuras policristalinas y las teorías de

crecimiento de grano.

3.2. Aproximación clásica

Simulaciones previas sobre el desarrollo de estructuras poligonales se pueden clasificar en tres categorías. Los modelos clásicos de Potts a través de Monte Carlo [174, 177–180] los cuales estuvieron entre los primeros y aún se encuentran entre los implementados con mayor frecuencia. Aquí, el espacio se subdivide en voxels a los que se les asigna una etiqueta que indica a qué grano pertenece. Los voxels se re-etiquetan de forma estocástica para minimizar la energía interfacial entre los granos vecinos. Si bien la implementación de este método es relativamente sencilla, algunas de las complicaciones que surgen incluyen las condiciones de los límites anisotrópicos [177, 180], el debilitamiento de las condiciones de los límites del ángulo dihedral [177, 180], la fijación de límites y el seguimiento cinético del proceso [177, 180]. Muy relacionado con estos modelos están el modelo autómatas celular [177, 180], que permite flexibilidad adicional en la definición de la energía.

Los modelos de campo de fase constituyen una segunda categoría de métodos de simulación [181, 182]. En este enfoque, los granos se representan como regiones en las que el valor de un parámetro de orden nominal, continuo, cambia hasta que el valor es mínimo. La evolución de la estructura se describe utilizando las ecuaciones de Ginzburg-Landau, dependientes del tiempo [181, 182], donde se asocian diferentes parámetros de orden con cada orientación del grano. Las modificaciones del funcional permiten la incorporación de efectos físicos adicionales pero difíciles de contrastar con experimentos [181]. Las limitaciones de este enfoque incluyen la inestabilidad numérica y el alto costo de representar sistemas con grandes cantidades de granos [181]. Las variaciones en este enfoque incluyen los campos continuos [181] y campos de fase múltiple [181]. La simulación del crecimiento de grano a través de Monte Carlo, por el movimiento de la interfaz controlado por difusión [181] comparte algunas características con los modelos de campo de fase y parece ser incondicionalmente estable, conceptual y computacionalmente directa, lo que permite la simulación de un gran número de granos y mejorar la estadística de los resultados.

Una categoría final de simulaciones de crecimiento de grano son los métodos de seguimiento frontal, incluidos los modelos de vertex [2, 183], los modelos de elementos finitos [184, 185] y los modelos de límites discretizados. Según lo desarrollado por los autores, [82, 186] en tales enfoques, la red de límites de grano se discretiza y evoluciona explícitamente sin dedicar memoria o capacidad de procesamiento a los interiores de grano. Si bien es computacionalmente eficiente y conveniente para la medición de características geométricas y topológicas, este enfoque requiere que todos los eventos topológicos que ocurren durante la evolución normal del grano se anticipen y manejen explícitamente. La complejidad asociada con la gestión de mallas ha sido un factor limitante en la implementación generalizada de este tipo de modelos.

3.3. Modelo clásico de Potts

La mayoría de enfoques evolucionan el sistema en la dirección del descenso más pronunciado de la energía, lo cual es proporcional a disminuir el área total del límite del grano [3], lo que es equivalente al flujo de curvatura media en un ajuste continuo. Una característica notable de las simulaciones es que las ecuaciones de movimiento se derivan directamente de la relación von Neumann-Mullins en dos dimensiones y la relación MacPherson-Srolovitz [187] en tres dimensiones. Esto significa que las simulaciones satisfacen las restricciones impuestas por estas relaciones con alta precisión. En algunos casos, la baja curvatura de la mayoría de los límites de grano puede justificar el uso de una discretización restringida para reducir los requisitos computacionales. En dos dimensiones, los límites que separan dos granos vecinos se unen como bordes y tres bordes se encuentran en un único vértice. En nuestro caso, cada simulación se desarrolla sobre una celda cuadrada, la cual representa $500 \times 500 \mu\text{m}^2$ con un espaciamiento regular igual a $1.25 \mu\text{m}$ y condiciones de frontera periódicas; la discretización se selecciona para garantizar la estabilidad y la precisión numérica. Las ecuaciones de movimiento se obtienen de la relación de von Neumann-Mullins, que describen la evolución del conjunto de granos como:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = -2\pi M\gamma \left(1 - \frac{\langle n \rangle}{6} \right) \quad (3-1)$$

donde $\langle A \rangle$ es el área de un grano, $\langle n \rangle$ es el número de bordes, M y γ son constantes escalares que describen la movilidad y la energía del límite del grano respectivamente. Este resultado es exacto para el crecimiento isotrópico en dos dimensiones, donde la energía total del sistema es proporcional a la suma de todos los bordes y el sistema evoluciona hacia un estado de mínima energía. Una dificultad con el uso de simulaciones para caracterizar el estado estable de los procesos que gobiernan la conformación de estructuras poligonales, es que el sistema debe evolucionar desde un estado inicial hasta el punto en que se alcanza el estado estable. Esto requiere que el modelo inicial permita la interacción con varias veces más granos que los que eventualmente contribuirán a las estadísticas de microestructuras en estado estacionario. Adicionalmente, dado que la condición de estado estacionario no está definida con precisión, la identificación del tiempo necesario para alcanzar esta condición es todavía una cuestión de controversia.

3.4. Esquema convencional de Potts

El modelo de Potts permite reproducir el comportamiento que se observa en estructuras granulares cuando fenómenos de crecimiento ideal proceden. La siguiente secuencia de pasos define el proceso [188–192]: (i) de manera aleatoria, se selecciona un sitio i y un sitio j los cuales se les asignó previamente una CO (Q_i y Q_j) respectivamente, Figura 3-1. (ii) se calcula el cambio en la energía

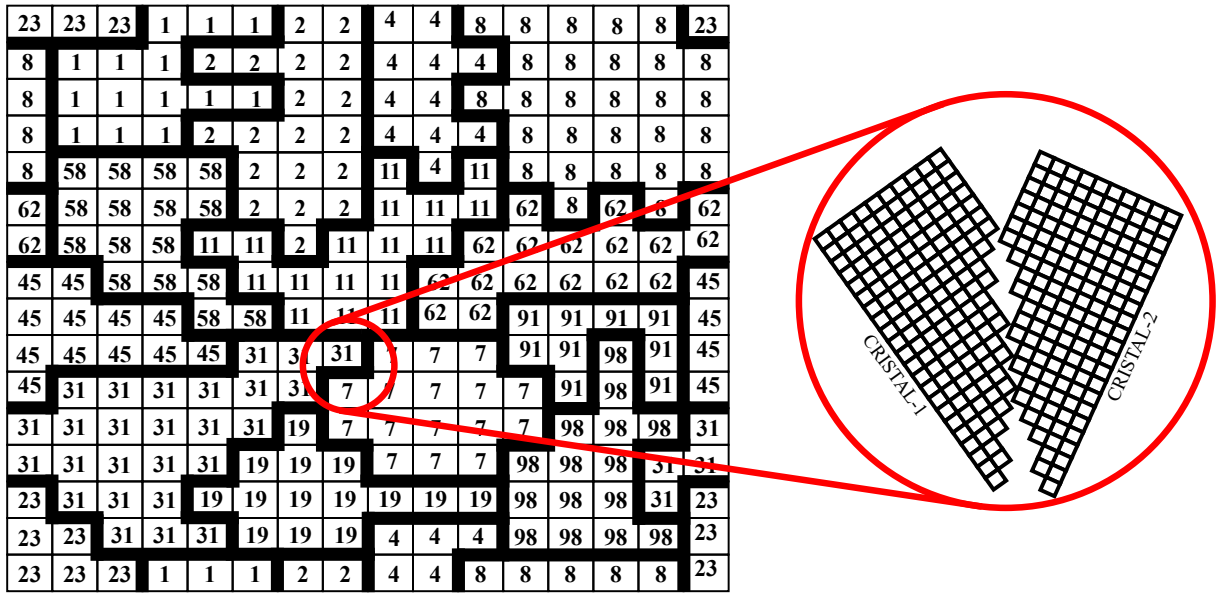


Figura 3-1.: La discretización de una microestructura según el modelo clásico de Potts, donde cada punto de la red tiene un estado asignado. Los puntos de red también poseen una energía según la orientación del grano. Fuente propia

$\Delta \mathcal{H}$ por cambiar la CO del sitio j por la del sitio Q_i . (iii) si el cambio no es favorable, cambiar la CO del sitio j por la del sitio Q_i se calcula con una probabilidad $P(\Delta \mathcal{H})$. Finalmente (iv) se incrementa el tiempo en $\Delta t = 1/N$, donde N es el número de sitios en la red.

El cambio en la energía $\Delta \mathcal{H}$ para un cambio de CO dado se determina al evaluar el Hamiltoniano de Potts. En esta parte, se utilizó la forma estándar del funcional. Durante la evolución de la microestructura, la fuerza motriz fundamental en el proceso de *coarsening* es la minimización de la energía superficial de la GB. A diferencia de los modelos de dinámica molecular, donde se necesita especificar los potenciales de interacción entre los átomos, o teorías de campo medio, donde la ley de von Neumann-Mullins [63] debe ser preservada, el modelo Q -Potts minimiza la energía total de la superficie. En el modelo clásico, la energía de la superficie en un punto de red se define por la energía libre proporcional al área total de la GB. Matemáticamente, cada sitio en la malla tiene un atributo físico definido como CO, o giro en el modelo de Ising. Todos los puntos de la red dentro de un grano dado tienen el mismo CO. La diferencia entre estas direcciones define la energía de la GB. La energía de interacción entre direcciones similares se toma como cero, y uno entre diferentes direcciones (definido por el delta de Kronecker δ_{ij}). Por lo tanto, la energía total es:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{nn} \gamma_{ij} (1 - \delta_{ij}) \quad (3-2)$$

donde i y j son los nodos del sistema y sus vecinos respectivamente, δ_{ij} es la función delta de Kronecker, que es 1 si $\theta_i = \theta_j$ y 0 de lo contrario, γ_{ij} mide la interacción del nodo i -th con su vecindario como una función de la CO entre dos granos. Esta interacción se calcula a través de la ecuación de Read-Shockley:

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} \gamma_0(\theta_{ij}/\theta_{cr}) [1 - \ln(\theta_{ij}/\theta_{cr})] & \theta_{ij} \leq \theta_{cr} \\ \gamma_0 & \theta_{ij} > \theta_{cr} \end{cases} \quad (3-3)$$

$$\theta_{ij} = 2n\pi/Q; n = 1, 2, 3, \dots, Q - 1 \quad (3-4)$$

donde γ_0 es la energía crítica para un ángulo crítico θ . Los valores de la ecuación de Read-Shockley dan buena concordancia con estimaciones experimentales, incluso hasta ángulos relativamente grandes. Para $\theta_{cr} \sim 25^\circ$, $\gamma \sim 0,4Jm^{-2}$, que sorprendentemente está cerca del valor de la energía por área [193]. La distribución del rango de vecinos y la forma de muestreo afectan la naturaleza de la interacción. Las simulaciones del modelo Q -Potts han usado tradicionalmente algoritmos de evolución locales como el de Metropolis et al., [194].

El siguiente esquema muestra el pseudo-código para la evolución:

Dinámica usando algoritmo de distribución de probabilidad Metropolis

Q_{old} = Estado actual del sitio

Q_{new} = Nuevo estado propuesto para el sitio

vecino_{old} = Número de sitios vecinos similares = Q_{old}

vecino_{new} = Número de sitios vecinos similares = Q_{new}

$\Delta\mathcal{H}$ = vecino_{old} - vecino_{new}

IF $\Delta\mathcal{H} \leq 0$ **THEN**

Q_{new} se acepta

ELSE IF $T > 0$ **THEN**

probabilidad = $\exp^{-\Delta\mathcal{H}/\gamma T}$ se acepta

aleatorio = Un número aleatorio distribuido uniformemente entre 0-1

IF aleatorio < probabilidad **THEN**

Q_{new} se acepta

END IF

END IF

Se elige un sitio de red de manera aleatoria y también se elige al azar cualquier otro de los posibles $Q - 1$. Este algoritmo se basa en la suposición fundamental de que el movimiento de la GB puede ser descrito como un proceso Browniano y puede ser controlado a través de la dinámica de Boltzmann [195–197]. Esta suposición es válida para agregados poligonales donde los átomos saltan hacia adelante y hacia atrás a través de la GB si la energía térmica es lo suficientemente alta [198]. La probabilidad de aceptar tal re-asignación es:

$$P = \begin{cases} m \cdot \exp(-\Delta\mathcal{H}/\gamma T) & \Delta\mathcal{H} \leq 0 \\ m & \Delta\mathcal{H} > 0 \end{cases} \quad (3-5)$$

donde $\Delta\mathcal{H}$ denota la diferencia entre la energía total antes y después de la reasignación de la CO, T es la magnitud de las fluctuaciones y m es la movilidad de la GB y viene dada por la función exponencial, medida por Huang & Humphreys [199] y también es función de la CO que sigue la teoría fenomenológica de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) [12–14]

$$m(\theta) = \begin{cases} 1 - \exp[-n(\theta_{ij}/\theta_{cr})^d] & \theta_{ij} \leq \theta_{cr} \\ 1 & \theta_{ij} > \theta_{cr} \end{cases} \quad (3-6)$$

donde, de acuerdo con los experimentos $n = 5$ y $d = 4$. La implementación del algoritmo clásico de Potts, tal cual se presenta acá, es una implementación directa de la secuencia de pasos dados anteriormente. Para cada paso de evolución, se realizan las siguientes operaciones:

Dinámica usando el algoritmo clásico del modelo de Potts

- 1 **FOR** $j = 1$ to N **DO**
- 2 $\mathcal{H}_i := 0$
- 3 $\mathcal{H}_f := 0$
- 4 selección de un sitio $i: i \in [1, \dots, N]$ aleatoriamente
- 5 selección de CO $Q_i: Q_i \in [1, \dots, Q]$ aleatoriamente

```

6   FOR vecinos  $k$  sitio  $i$  DO
7     IF  $Q_k \neq Q_i$  y  $\Delta\mathcal{H} < 0$  THEN
8        $\mathcal{H}_i := \mathcal{H}_i + \mathcal{H}_0$ 
9     ELSEIF  $Q_k \neq Q_i$  y  $\Delta\mathcal{H} \geq 0$  y  $P(\Delta\mathcal{H}) > \text{aleatorio}()$  THEN
10       $\mathcal{H}_f := \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_0$ 
11    END IF
12  END DO
13 END DO
14  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}_f - \mathcal{H}_i$ 
15 cambio  $k$  por  $Q_i$  con probabilidad  $P(\Delta\mathcal{H})$ 
16 incrementar tiempo  $1/N$  pasos de Monte Carlo

```

Por lo tanto, cada paso de Monte Carlo requiere N (número de nodos totales del sistema) iteraciones de un bucle de vecinos (líneas 6-13) más N iteraciones de algunas operaciones de tiempo (líneas 1-5 y 14-16), por lo que el tiempo de cálculo característico para el modelo clásico es

$$t_{CPU} \sim \kappa N(\text{vecinos} + \text{operaciones}) \quad (3-7)$$

donde la constante de proporcionalidad κ depende del tipo de máquina y los detalles de la simulación. Teniendo en cuenta que para un N dado y un grupo de vecinos fijos, el tiempo de cálculo por paso no cambia a medida que avanza la simulación. Dado que las aplicaciones típicas del modelo Potts pueden requerir hasta $10^6 - 10^8$ muestreos por simulación, la dependencia lineal del tiempo de cálculo con el tamaño de la red puede ser demasiado lenta para simulaciones de redes grandes. Sin embargo, existe una aparente ineficiencia en el algoritmo convencional. En una estructura granular evolucionada a bajas temperaturas, en relación con la temperatura crítica, es poco probable que los sitios dentro del interior del grano cambien a cualquier otro valor, ya que un giro implicaría un gran costo de energía $\Delta\mathcal{H} = NN(\mathcal{H}_0)$. Solo los sitios en la GB tendrán una gran posibilidad de variar y en la etapa final del proceso solo tendrán un valor de giro representado entre los vecinos más cercanos del sitio. Por lo tanto, a medida que los granos aumentan de tamaño, cada vez menos iteraciones del bucle convencional de Monte Carlo darán lugar a cambios. Para configuraciones de θ_{ij} bajas, la estructura desarrollada se compone de granos irregulares y asimétricos, mientras que para configuraciones de θ_{ij} altas, los granos son más compactos y simétricos [5, 188–191]. En el límite bajo de θ_{ij} , cuando los granos se encuentran y se unen con otros granos del mismo valor de

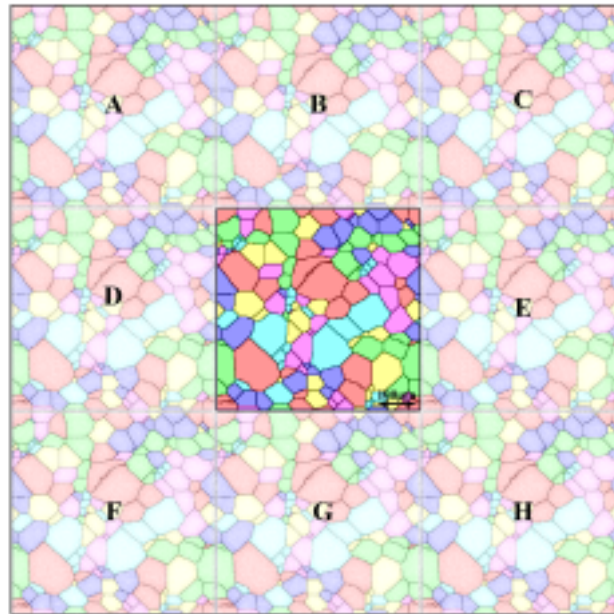


Figura 3-2.: Esquema bidimensional de la evolución de grano de un sistema con límites periódicos. Fuente propia.

misorientación, sus áreas tienen grandes cambios discontinuos [188]. Durante las simulaciones del modelo clásico de Potts a bajas temperaturas, la GB tiende a alinearse preferentemente a lo largo de CO de baja energía (límites coherentes) [200–204]. Como resultado, el *coarsening* disminuye la velocidad gradualmente y finalmente se detiene por completo. Una forma de ayudar a que el sistema salga, durante el proceso de minimización de energía del mínimo local de esta configuración, es trabajar a una temperatura más alta donde la activación térmica permite que la GB supere la anisotropía permitiendo que el proceso continúe. Experimentalmente en agregados poligonales, las temperaturas más altas producen mayores tasas de crecimiento [193, 205, 206].

En todos los sistemas, las condiciones de frontera periódicas, o las condiciones de Born-von Karman, fueron consideradas como una aproximación a sistemas más grandes, los cuales utilizan una pequeña parte del sistema llamada unidad-celda. Los PBC consideran que la celda unitaria original está rodeada por copias de la celda unitaria original llamadas imágenes, como se muestra en la Figura 3-2, donde las imágenes de la celda original son A, B, C, ..., H. Cuando un grano evoluciona a través de un borde, por ejemplo, los granos verdes de la Figura 3-2 salen de la celda original a la celda de la imagen (B, D, E y G), el borde opuesto ingresa a la celda unitaria. Este proceso se repite en todas las celdas de la imagen y en todos los límites periódicos, de modo que el número de granos en todas las celdas unitarias permanece constante. En términos matemáticos, si un grano está ubicado en la posición r en el cuadro bidimensional, se supone que el grano representa un conjunto infinito de partículas ubicadas en $r + l\mathbf{x}_1 + m\mathbf{x}_2$, ($l, m = -\infty, \infty$), donde l y m son enteros y \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 son vectores correspondientes a los ejes de la caja. Todas las imágenes de granos evolucionan juntas y solo una de ellas está representada en forma real.

3.5. Estado estacionario canónico

Una razón por la que las microestructuras de crecimiento de grano en estado estable son tan importantes es que a pesar del hecho de que las ecuaciones de evolución (flujo de curvatura media) son simples, las microestructuras resultantes son particularmente complejas; es decir, una amplia gama de microestructuras iniciales diferentes eventualmente evolucionan a una microestructura estadísticamente idénticas. Para ilustrar este punto, construimos tres microestructuras iniciales diferentes y les permitimos evolucionar durante un tiempo suficiente para que sus propiedades estadísticas se estabilicen (es decir, alcancen el comportamiento de estado estable). Las tres condiciones iniciales consideradas aquí se construyeron a través del modelo clásico de Potts con ángulos de orientación que variaron entre 100, 1000 y 10000, para sistemas con 160000 nodos. El primer sistema que consideramos resultó de un proceso aleatorio donde las coordenadas de cada punto se eligieron con probabilidad uniforme, el sistema fue enfriado desde una temperatura de 10000°C. Para construir el segundo sistema, el sistema fue enfriado desde una temperatura de 1000°C. Finalmente, el tercer sistema el sistema fue enfriado desde una temperatura de 100°C. En los tres casos, evolucionamos los sistemas según el algoritmo convencional de Potts durante un tiempo suficientemente largo (medido en unidades arbitrarias) en el que todas las propiedades estadísticas lograron un estado estable dentro del error estadístico y el sistema se enfrió hasta garantizar que las fluctuaciones locales en la GB eran mínimas.

La Figura 3-3 (superior-izquierda) muestra como para una temperatura definida los estados finales de los tres sistemas evolucionan hasta llegar a un mismo punto común, con características similares pese que para pocos ángulos de orientación se favorece la coalescencia inducida; la figura de la derecha muestra la evolución del número de granos durante el proceso así como el radio medio del conjunto (figura interna), se aprecia cómo el radio medio fluctúa a medida que los sistemas se evolucionan bajo el flujo de su curvatura. La Figura 3-3 (medio-izquierda). muestra la evolución de la fracción de grano en los tres sistemas junto con su evolución en el número de granos y el tamaño medio. La conducta es similar al primer sistema a pesar de cambiar las condiciones de inicio del simulador. La Figura 3-3 (inferior-izquierda) presenta los resultados para el sistema con menor temperatura. Se aprecia que el sistema evoluciona de la misma manera que las condiciones anteriores. Finalmente, a pesar de haber comenzado con distribuciones de tamaño de grano drásticamente diferentes, los tres sistemas evolucionan al mismo estado estacionario. Las propiedades estadísticas de los tres sistemas son efectivamente idénticas, lo que respalda la idea que las condiciones iniciales se olvidan eventualmente después de que un sistema se haya endurecido por el crecimiento de grano durante un tiempo suficiente. La convergencia de diferentes microestructuras aleatorias para el mismo estado estable estadístico también se puede observar directamente a través de las secciones transversales iniciales y finales típicas de todas las condiciones. Esto permite observar que a pesar de los diferentes aspectos iniciales y grados de orden, las tres microestructuras finales podrían ser fácilmente áreas diferentes de una sola estructura.

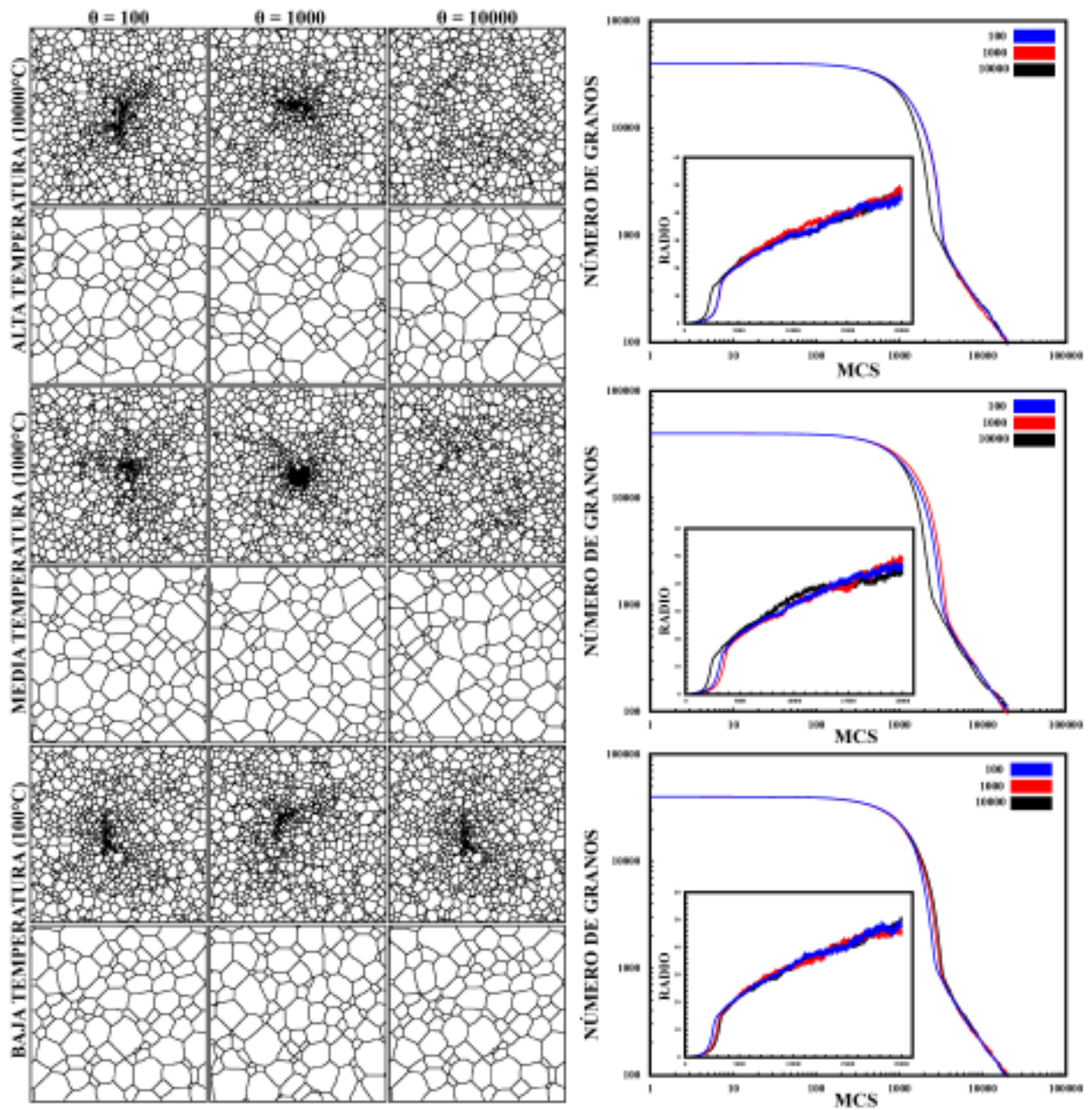


Figura 3-3.: Secciones transversales de tres procesos para diferentes condiciones iniciales distintas junto con la microestructura de crecimiento de grano en estado estable resultante de ellas. Fuente propia.

3.6. Caracterización

Esta sección presenta los datos de microestructuras inicializadas a partir de puntos distribuidos aleatoriamente, que evolucionaron mediante el algoritmo de crecimiento de grano (flujo de curvatura) hasta que se logró un estado estable estadístico. Los datos fueron promediados a partir de cinco simulaciones independientes, bidimensionales, las cuales comenzaron con 40.000 granos y alcanzaron un estado estable cuando quedaba aproximadamente 800 granos (punto de cambio de pendiente en la Figura 3-3). Luego de este valor, las muestras proporcionaron estadísticas bidimensionales para la descripción de su distribución de lados y distribución de tamaño medio. Aunque no parece haber consenso en la literatura sobre la fracción precisa de granos que quedan cuando se alcanza el estado estacionario [207], creemos que nuestras condiciones son conservadoras. Presentamos la descripción de las microestructuras, en estado estable, en función de la temperatura y el ángulo de orientación, para definir características geométricas y topológicas del conjunto de granos, por ejemplo, las distribuciones de los tamaños de grano, el número de granos y el número de vecinos de cada grano. Nos referimos a estos como cantidades puntuales para enfatizar que miden las características asociadas con el conjunto de granos. Finalmente, dada la evidencia sustancial de que la microestructura en estado estable está bien definida, argumentamos que el estado estable es una aproximación más razonable para los materiales policristalinos reales que la construcción convencional de estructuras de Poisson-Voronoi utilizada con frecuencia.

3.6.1. Cantidades puntuales

Las estadísticas reportadas con mayor frecuencia que describen microestructuras de crecimiento de grano estable son características de granos individuales. En esta sección, consideramos distribuciones de cantidades de granos que incluyen el número de lados así como la distribución de tamaños. Además de la ley de Lewis, también se incluye la correlación de von Neumann-Mullins para el número de lados y el tamaño medio de grano en dos dimensiones. La relación de von Neumann-Mullins indica que el número de lados de un grano en el sistema 2D determina completamente la tasa de cambio del área de un grano, lo que sugiere que la distribución del número de bordes es importante para la evolución de la microestructura en su conjunto. Esta distribución, para las configuraciones de la Figura 3-3, se informa en la Figura 3-3A. Una consecuencia del teorema de Euler es que el número promedio de bordes por grano en los sistemas 2D debe ser exactamente seis. Los datos de simulación muestran $6,000 \pm 1,5$ bordes por cara, con una desviación estándar de $1,773 \pm 0,001$. Del mismo modo, no se conoce ninguna función analítica que proporcione las distribuciones a pesar de algunos intentos recientes [94, 208]. Sin embargo, la sorprendente similitud en las formas de las distribuciones para los bordes por grano sugiere la existencia de una causa fundamental compartida. Mientras tanto, la diferencia en las distribuciones de bordes por grano, junto con otras pruebas en la literatura, deja en claro la dificultad de comparar directamente simulaciones bidimensionales con secciones transversales de muestras experimentales. Este es el caso a

Tabla 3-1.: Influencia de $\Delta\mathcal{H}$ y la temperatura en la cinética y el estado de equilibrio del sistema.
Fuente propia.

Temperatura cero $T \rightarrow 0$	$\Delta\mathcal{H} \geq 0$ $\Delta\mathcal{H} < 0$	$P(\Delta\mathcal{H}) \rightarrow 0$ $P(\Delta\mathcal{H}) \rightarrow 1$	Sistema en equilibrio, Todos los CO en la misma dirección de \mathcal{H}
Temperatura infinita $T \rightarrow \infty$	$\Delta\mathcal{H}$	$P(\Delta\mathcal{H}) \rightarrow 1$	Entropía del sistema en estado de desorden completo CO completamente orientado al azar
Temperatura finita $T < T_{cr}$	$\Delta\mathcal{H} \leq 0$ $\Delta\mathcal{H} > 0$	$P(\Delta\mathcal{H}) \geq 1$ $P(\Delta\mathcal{H}) \leq 1$	T se expresa en términos de la relación \mathcal{H}/k_B. Cambios en T \rightarrow transiciones discontinuas o transiciones continuas
Temperature finita $T > T_{cr}$	$\Delta\mathcal{H} \leq 0$ $\Delta\mathcal{H} > 0$	$P(\Delta\mathcal{H}) \geq 1$ $P(\Delta\mathcal{H}) \leq 1$	Igual que el proceso anterior

pesar de los resultados sugerentes reportados por Anderson et al. [209] donde estas distribuciones casi se superponen.

Este enfoque clásico, tiene en cuenta que la movilidad de los límite de grano es finita. Adicionalmente, una temperatura de cero en la función de distribución de probabilidad no corresponde a una temperatura física de cero durante la simulación Monte Carlo; por el contrario, el ajuste de $T = 0$ solo elimina las fluctuaciones térmicas de la energía, lo cual permite de forma activa que durante el movimiento del límite la relajación proceda con mayor probabilidad en lugar de la migración. Inversamente, si la temperatura incrementa aumenta por encima de una temperatura crítica (T_{cr})¹. $T_{cr} = 2,269185\mathcal{H}/k_B$ para redes cuadradas y sistemas 2D, y es fuertemente dependiente de Q y el tipo de red usada durante la simulación), Tabla 3-1 muestra la influencia de $\Delta\mathcal{H}$ y la temperatura en la cinética y el estado de equilibrio del sistema. Cuando las fluctuaciones térmicas son suficientes altas para causar el desorden del sistema (migraciones que incluso incrementan la energía local del sistema); los sitios de red que están ocupados por cambios de CO aleatorios no se producen un proceso de engrosamiento. En la primera parte del presente trabajo, utilizando la simulación clásica de Monte Carlo, el tiempo se incrementaba después de cada intento de cambio de CO por $1/N$. Se espera que el tiempo de Monte Carlo se amplíe linealmente con el tiempo real para los procesos de evolución porque esta aproximación se basa en el supuesto fundamental de que el movimiento de la GB es Browniano y puede describirse mediante la dinámica de Boltzmann, lo que implica que los cambios sólo se producen en las GB y como el área disminuye, el muestreo cada vez es más ineficiente.

Estos resultados se comparan bien con la distribución de bordes por grano como lo muestran otras simulaciones recientes [210–212] y proporcionan evidencia adicional de que la distribución alcanza su punto máximo en seis lados en lugar de cinco. Esto está en contradicción con los resultados de simulaciones como [5] y datos experimentales como [213] debido a que el estado de mínima energía en el modelo de Potts es un único grano. Independientemente de las características que muestran las Figuras 3-4A y B, notamos que hay una diferencia importante en lo que miden. En

¹ T_{cr} la cual es una temperatura por debajo de la cual el sistema se ordena espontáneamente

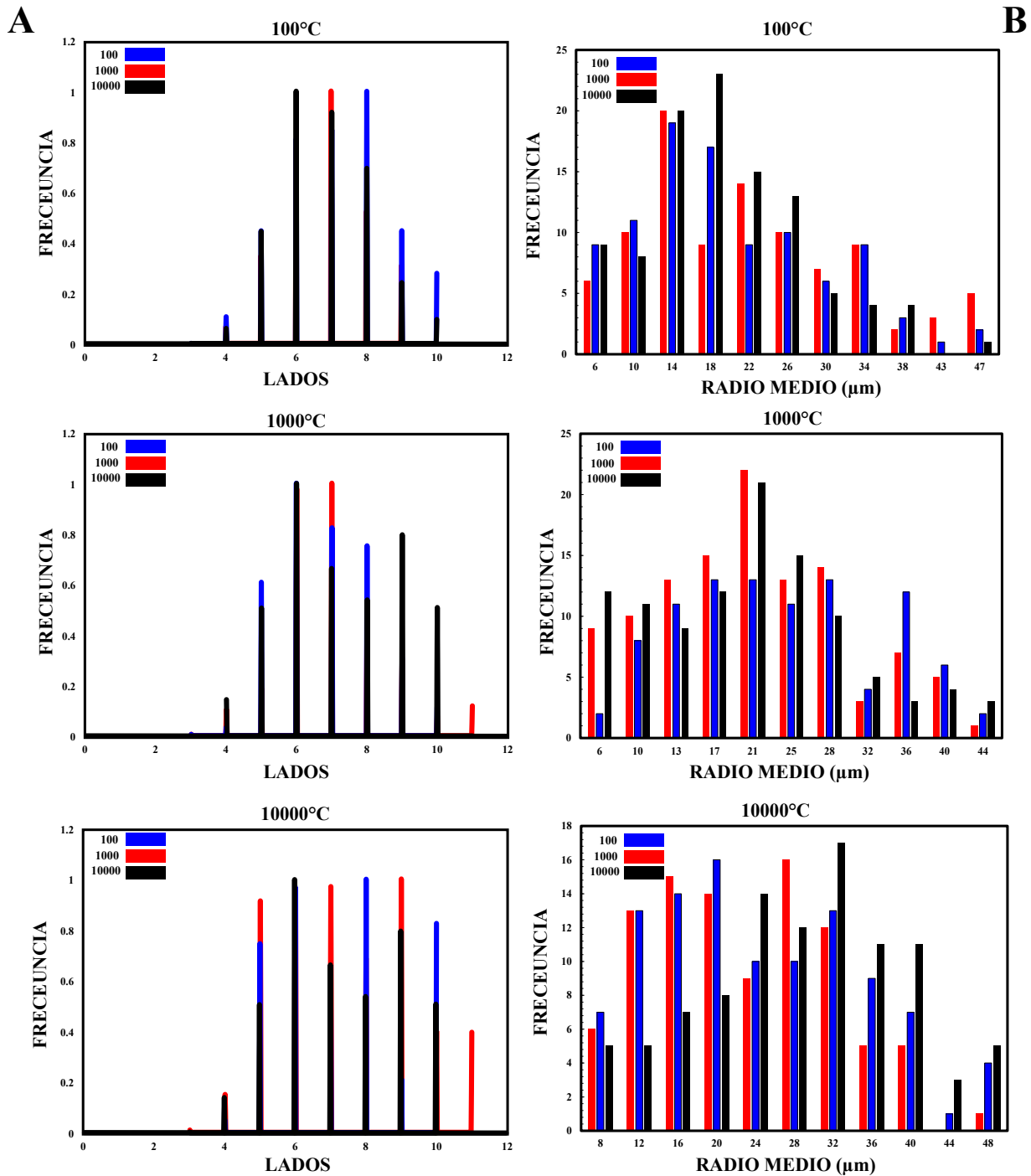


Figura 3-4.: A: distribución de lados para las secciones transversales de tres procesos para diferentes condiciones iniciales distintas. B: distribución de tamaños. Fuente propia.

dos dimensiones, el tipo de grano combinatorio se describe completamente por su número de caras. Es decir, cualquier grano con n bordes tiene exactamente la misma estructura combinatoria que cualquier otro grano con n bordes. Por ejemplo, los granos con 8 caras pueden tener uno de 14 tipos distintos, mientras que los granos con 9 caras pueden tener uno de 50. A medida que aumenta el número de caras, el número de tipos combinatorios distintos aumenta más rápido, de manera exponencial, lo que muestra el alto grado de complejidad para sistemas 3D. Una de las descripciones más accesibles y físicamente relevantes de una microestructura es la distribución de tamaños de grano (Figura 3-3B), aunque ésta se puede medir de diferentes maneras, la medida más común es el radio de grano efectivo, es decir, la raíz cuadrada del área de un grano bidimensional o la raíz cúbica del volumen de un grano tridimensional.

Este comportamiento de escalamiento puede derivarse en analogía con el análisis de Burke & Turnbull sobre la tasa de migración de los GB. Teniendo en cuenta que todos los átomos, a lo largo de un límite curvo, son energéticamente equivalentes; en el modelo Q -state Potts, solo se invierte en ciertos sitios preferenciales, es decir, los sitios con $\Delta\mathcal{H} < 0$) que contribuyen favorablemente a la migración; los cambios en la CO en todos los demás sitios, da como resultado fluctuaciones en torno a una posición límite media, por lo general estacionaria. Suponiendo que la energía de estos sitios preferenciales se pueda distribuir entre todas las ubicaciones, de modo que cada ubicación en la GB tenga una energía libre de activación $\alpha\Delta\mathcal{H}$ y una energía libre de giro $\alpha\Delta\mathcal{H}$, donde α es la fracción de sitios que son preferencialmente activos [214–216].

Teniendo en cuenta que debido a que la transferencia de átomos a través entre GB, y que el proceso es discreto siguiendo dinámica Browniana, ciertas posiciones preferenciales se pueden ver potenciadas pero donde la solución puede aparecer vía discretización fina del modelo de Potts, el cual, es mecánicamente superior a los modelos continuos [74, 217–220]. Además, dado que el proceso de evolución del grano es discreto, y a través del formalismo de velocidad de reacción absoluta y la derivación de Burke & Turnbull sobre la fuerza impulsora de la GB la cual, aplica a la evolución de la microestructura en el mismo sentido promedio que dicta el modelo Q -state Potts. Una de las mayores ventajas del modelo de Potts (y que están incluidas en sus variaciones) para la evolución de agregados poligonales, es la diversidad de sistemas que pueden simularse utilizando un funcional fenomenológico de energía libre modificado. Como se mencionó previamente, el Hamiltoniano estándar $\gamma_{ij} = \gamma_0$ el cual corresponde al crecimiento isotrópico de grano, en sistemas monofásicos, además, se puede usar para modelar la evolución del sistema inhibido por partículas inertes y condiciones de Creep, como se discutirá en el capítulo 5 y se esbozará un esquema en el capítulo de conclusiones.

Es importante resaltar que si bien el modelo clásico de Q -state Potts puede simular diversos procesos de crecimiento, su estructura fundamental (a diferencia de los procesos difusionales en la GB) no incluye ningún otro mecanismo de evolución. Por lo tanto, el modelo proporciona un sistema experimental inicial, general y flexible, de investigación sobre la evolución de sistemas con cierta complejidad, pero sólo es el punto de partida para una descripción más amplia de éstos fenómenos

evolutivos. Pero, la adaptación e implementación del algoritmo de Metropolis para modificar y seguir la cinética de las configuraciones que evolucionan bajo un Hamiltoniano fenomenológico, ha permitido una expansión significativa del rango de preguntas que los métodos podrían responder. Un nuevo campo de interés, que nace a principios de la década de 1980, es el estudio de la dinámica del crecimiento de sistemas granulares en metales policristalinos. La mayoría de los metales y aleaciones, en estado puro, incluso algunos sistemas cerámicos, están compuestas por cristales (o granos), cada uno de los cuales tiene una orientación particular (definida por el valor resultante de la rotación de los ángulos de Euler) [19]. Los átomos en la superficie de estos granos tienen una energía más alta que aquellos al interior debido a sus vecinos faltantes donde es posible definir el exceso de energía como una energía límite.

Los átomos en las regiones convexas de la superficie de un grano tienen una energía más alta que las regiones cóncavas, debido a que tienen más vecinos faltantes. Por lo tanto, un átomo en un límite curvado convexo puede disminuir su energía migrando a través de la GB hacia el lado cóncavo [24, 35–37]. Las migraciones colectivas, que pueden ser representadas de manera equivalente como la movilidad de la GB, reducen la energía de la configuración, pero requieren activación térmica porque un átomo tiene una energía más alta cuando está en el espacio entre los granos que cuando está al interior formando parte de uno. Por lo tanto, mientras que los granos son estructuras estables a bajas temperaturas, a altas temperaturas se potencian cambios a través de un proceso de *coarsening*, como consecuencia el tamaño neto de los granos crece debido a la desaparición de los granos pequeños durante en el proceso [93]. En nuestra simulación, el balance detallado se ve garantizado a través del algoritmo de Metropolis. Para temperaturas bajas, al usar el Hamiltoniano de Potts y la dinámica Metropolis modificada, los granos individuales evolucionan de una manera que se asemeja al crecimiento de un sistema policristalino durante el proceso de recocido a altas temperaturas. La evolución de las distribuciones de dominios, formas, tamaños y correlaciones coincide con lo reportado [221].

3.6.2. Ley de Lewis, ley de Feltham y generalizaciones

Si bien no se reconoce ampliamente la importancia de las poblaciones de granos combinatorialmente distintas a los picos de la función de distribución, la importancia de las clases combinatorialmente distintas se ha considerado en otros contextos. Cuando investigaba una sección de la epidermis de pepino, Lewis [222] notó que las áreas celulares parecían ser proporcionales a su número de lados n , para valores de n que oscilan entre aproximadamente cuatro y siete. Esta relación a menudo se conoce como ley de Lewis y juega un papel importante en la aplicación del formalismo de máxima entropía a las propiedades estructurales de las redes celulares.

Si bien se cree que la ley de Lewis es un resultado general que se mantiene en un amplio rango de n (descuidando la calificación original de Lewis), y el comportamiento del área de los granos (Figura 3-5), para todas las temperaturas y ángulos evaluados, pareciera incrementar monótonicamente con

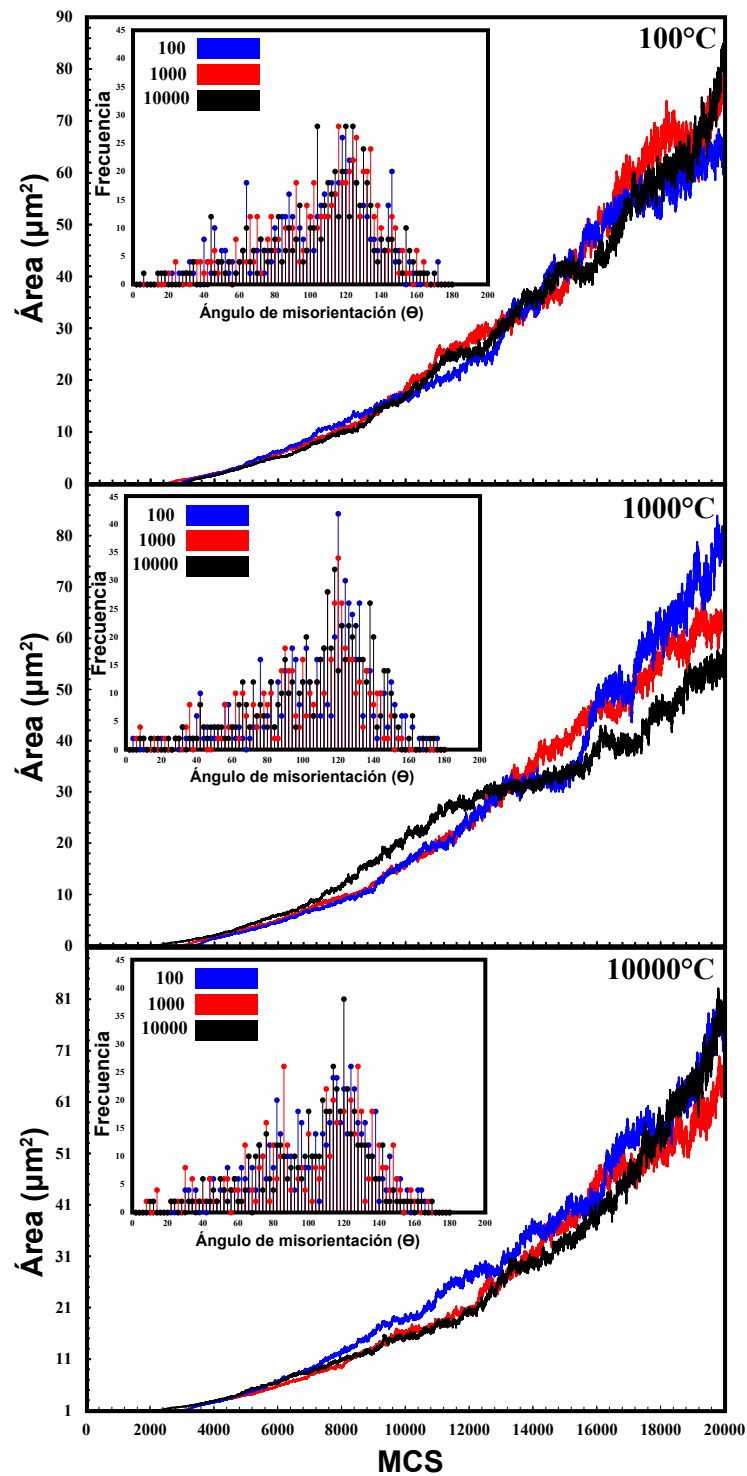


Figura 3-5.: comportamiento del área de los granos para todas las temperaturas y ángulos evaluados donde el sistema incrementa monótonicamente con la evolución del proceso, siguiendo una conducta como la descrita por von Neumann-Mullins. Fuente propia.

la evolución del proceso, siguiendo una conducta como la descrita por von Neumann-Mullins, con valores consistentes para una cinética de crecimiento normal, la proporción de granos finales con 6 lados (Figura 3-5 interna) sugiere que esta extensión de la ley de Lewis se mantendría solo para una fracción relativamente pequeña de los granos en el sistema. Feltham [223] proporcionó datos experimentales sobre estaño recocido en apoyo de la afirmación de que la medida lineal promedio de un grano bidimensional aumenta linealmente, previo a un proceso de nucleación, con su número de bordes; esto se conoce como la ley de Feltham. Por supuesto, un solo sistema no puede seguir simultáneamente la ley de Lewis y la ley de Feltham, y la precisión respectiva de los dos es una pregunta que ha recibido cierta atención. Sin embargo, con respecto a nuestras simulaciones, la ley de Feltham no parece tener un buen ajuste.

3.7. Conclusiones

Siguiendo la forma de la Figura 3-5, la estructura de equilibrio del cristal es creada por el aplanamiento de diferentes caras (planos); que al hacerlo, cuanto más grandes son los índices cristalográficos del plano, más pequeña es su área. Esto implica que la forma de equilibrio del cristal es consistente con un pequeño número de secciones planas con poca energía, las cuales están conectadas por partes curvas, donde se representan todos los planos cristalográficos.

Los resultados sugieren la existencia de una microestructura granular estadísticamente estable ha sido comúnmente conjeturada en estudios de crecimiento de grano. Para lograr tal estado estacionario estadístico, la microestructura debe experimentar un crecimiento de grano durante el tiempo suficiente para que el sistema olvide su estado inicial. En las simulaciones, el estado inicial suele ser una configuración aleatoria de una distribución de puntos, mientras que en el experimento se hereda del procesamiento anterior. La evolución sustancial requiere que las simulaciones de crecimiento comiencen a partir de un gran número de granos iniciales, de modo que cuando se miden las estadísticas, la mayoría de los granos iniciales se han consumido. En el presente estudio, informamos el análisis estadístico de los conjuntos de datos de simulación de microestructuras poligonales normales en dos dimensiones producidos. Estas simulaciones son consistentes con la relación von Neumann-Mullins. Sin embargo, el estado estable es alcanzado por el sistema porque éste queda atrapado en mínimos locales de energía, como lo sugieren las gráficas de número de granos con la duración de la simulación.

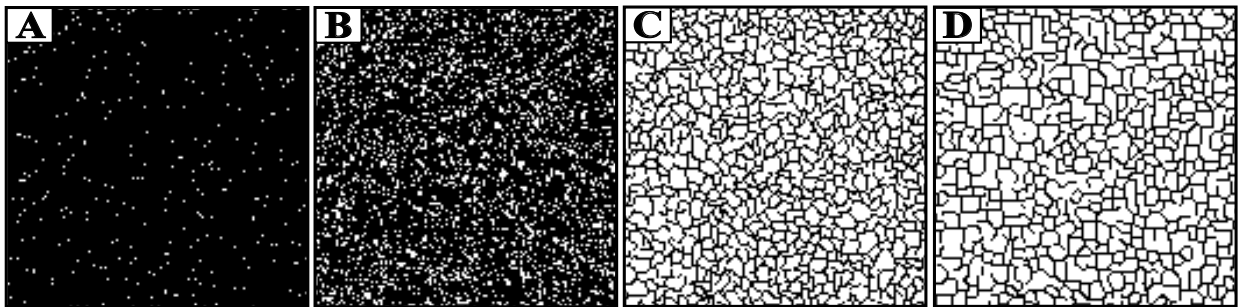
Los resultados que se presentan aquí ilustran vívidamente una serie de diferencias cualitativas entre los sistemas bidimensionales y las secciones transversales de sistemas reales. La distribución de los bordes en las secciones transversales es notablemente más amplia, al igual que la distribución de tamaños. Por lo tanto, las secciones transversales contienen una fracción más grande de granos con muchos lados, así como una fracción más alta de bordes muy largos. Además, los granos en el sistema bidimensional son significativamente más circulares que los granos en las secciones

transversales (razón de aspecto medida por la razón entre los radios de Feret mínimo y máximo). Estas diferencias pueden explicarse considerando que los sistemas bidimensionales evolucionan a través de una trayectoria de descenso más empinada en energía, y esto es proporcional a la longitud total de los límites de grano. Esto inhibe el desarrollo de bordes muy largos, granos con muchos bordes y granos con relaciones isoperimétricas bajas. Debido a que la evolución de las secciones transversales de baja temperatura no se rige por las mismas consideraciones de minimización de energía, los granos tienden a ser menos circulares, y los bordes largos y los granos con muchos lados surgen con más frecuencia. Para sortear algunos de estos aspectos, es necesario integrar al sistema de minimización mecanismos adicionales para garantizar que el sistema evoluciona hasta un estado en el que un único grano no es el estado más probable.

La característica más prominente que distingue los sistemas bidimensionales genuinos de las secciones transversales de simulación se puede observar en las distribuciones de áreas de grano y lados. Los sistemas bidimensionales simulados exhiben distribuciones bimodales que disminuye a altas temperaturas, mientras que las secciones transversales exhiben unimodales. Aunque estas características se han observado anteriormente, no se dispone de datos suficientes para sacar conclusiones definitivas sobre esta parte del modelo. Dada la precisión en los datos reportados aquí, estas dos tendencias no pueden atribuirse al ruido. Parece que resultan del papel que juega la topología en la evolución de los sistemas bidimensionales genuinos, que no juega en la evolución de las secciones simuladas, sugiriendo la ausencia de mecanismos adicionales. También encontramos que ni la ley de Lewis ni la ley de Feltham describen con precisión la relación entre el número de bordes de un grano en dos dimensiones y su tamaño. Es decir, el volumen de un grano parece crecer linealmente con su número de caras como lo predice von Newumann-Mullins.

Finalmente, dado que las microestructuras de crecimiento de grano en estado estable queda razonablemente bien definida, comparaciones con microestructuras de Poisson-Voronoi no son significativas. Se encuentra que la microestructura de Poisson-Voronoi difiere drásticamente, lo que sugiere que es una representación deficiente de las microestructuras policristalinas que han experimentado un extenso crecimiento de grano. No obstante, la facilidad para construir microestructuras ha llevado a muchos investigadores a usarlas para representar materiales policristalinos independientes del contexto físico. Sostenemos respetuosamente que esta práctica debe ser descontinuada.

4. FUNCIONAL FENOMENOLÓGICO, MODIFICADO, DE ENERGÍA LIBRE



EL desarrollo de cierto grado de control sobre las propiedades mecánicas de materiales con una microestructura de tipo agregado poligonal, en el contexto de metalurgia física o petrofísica, es uno de los principales desafíos en ingeniería moderna, ya que implica la comprensión y la capacidad de modificar las características microestructurales del sistema. Convencionalmente, los mecanismos descritos por la ecuación de Read-Shockley son poco conocidos o sólo parcialmente implementables y sólo unas pocas investigaciones sistemáticas sobre las movilidades de límites de grano proporcionan algunas pistas sobre las interacciones fundamentales que son responsables por la captura de las características del agregado. Algunas de estas interacciones son: migración de límites de grano, movilidad de límites de grano e, incluso en algunos casos, rotaciones de grano que podrían conducir a la coalescencia de los dominios vecinos mediante la eliminación del límite común entre ellos. Estos mecanismos pueden super-imponerse de maneras complejas y los resultados generalmente se deducen de los ajustes de datos experimentales. En este sentido, en esta parte del trabajo, se desarrolló un esquema computacional para capturar la microestructura de tres diferentes agregados poligonales a través de simulación Monte Carlo, utilizando un funcional fenomenológico de energía libre, teóricamente informado, el cual permite incorporar aspectos relevantes de la física del sistema para reproducir las características topológicas que se observan en sistemas reales, permitiendo controlar la respuesta física del agregado, otorgando control sobre el sistema. De esta manera, se implementó una extensión 2D del modelo modificado de Q -Potts, en el que se incluyó penalidades energéticas logradas mediante la adición de dos restricciones

elásticas; habilitándonos para proporcionar una descripción teórica completa del agregado, cuantificando correctamente los resultados y permitiendo contrastarlos experimentalmente. Nuestros hallazgos proporcionaron un conocimiento concluyente sobre la forma correcta de capturar una microestructura con las mismas características de estructuras poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas, fenómenos de crecimiento, influencia de segundas fases y partículas dispersas en la matriz, así como un punto de partida para el estudio de fenómenos de deformación en régimen elástico.

4.1. Introducción

Durante los procesos de transformación en estado sólido, una amplia gama de mecanismos interactúan de forma compleja para reproducir estructuras poligonal, en donde algunas características como el tamaño, la forma y la distribución pueden alterar la respuesta de las propiedades macroscópicas del agregado. La migración del límite de grano (GB), es un ejemplo de estos comportamientos, la cual depende en gran medida de los parámetros de procesamiento y puede modificar drásticamente las propiedades mecánicas, que a su vez se ven afectadas principalmente por el tamaño de grano, completando un *loop* sobre el diseño y conducta del material. Estos temas han llamado la atención a lo largo de años, no solo académicamente sino también desde una perspectiva tecnológica, en la que la modificación de la microestructura ha permitido mejorar la respuesta mecánica en varias aplicaciones de alto impacto [19, 182]. Por ejemplo, en petrología, donde los cristales de minerales de texturas metamórficas estáticas crecen en ausencia de deformación (o después de que la deformación ha cesado) se caracterizan por granos equantes y poligonales, que tienden a cruzarse en límites triples, separados por ángulos de 120° grados cada uno, lo que indica un acercamiento al equilibrio estático local entre las tensiones interfaciales [186, 224, 225]. Este ángulo, llamado ángulo dihedral, se rige por la energía de la superficie y explica qué tan bien definida está la forma de las caras poligonales.

En este sentido, el modelado para capturar las características principales en agregados poligonales ha sido durante mucho tiempo un tema de interés multidisciplinario. En los últimos 50 años, los enfoques experimentales y teóricos se han concentrado a través de aproximaciones como: teoría de campo de fase continuo [181, 182], modelos de vertex [2, 183], teselaciones de Voronoi [226], estructuras autómatas, [227–229], y modelos de Monte Carlo, a partir del modelo de Potts (MCPM) [174, 177–180]. Todos los enfoques mencionados anteriormente se implementaron inicialmente para sistemas 2D, en casos ideales para la evolución de estructuras granulares, pero con algunos problemas para definir una escala temporal adecuada de la evolución. Inicialmente, todos estos se formularon en el contexto del crecimiento ideal de grano, pero rápidamente demostraron su utilidad en el estudio de diferentes aspectos, incorporando elementos específicos correspondientes a procesos microestructurales. Para estos desarrollos, los modelos teóricos y computacionales han obtenido conclusiones similares sobre aspectos dinámicos y topológicos a

pesar de las diferencias entre las metodologías subyacentes. De la lista anterior, MCPM es uno de los métodos más prominentes y durante las últimas décadas ha proporcionado una fuente continua de investigación, ya que exhibe un comportamiento crítico intenso, aunque tiene una estructura simple [50, 230, 231].

Cabe resaltar que desde esta perspectiva, el modelo modificado de Q -Potts contiene un conjunto de ideas centrales para describir una microestructura de agregados poligonales: (i) la energía de superficie entre estructuras vecinas representa la energía por unidad de área de la GB; (ii) la temperatura determina la probabilidad de una configuración a través de la distribución de Boltzmann; (iii) los dominios individuales tienen orientaciones cristalográficas individuales, y (iv) el procedimiento de minimización de la energía de la GB se ha utilizado para modelar procesos de evolución microestructural. Sin embargo, la representación subyacente del modelo todavía tiene varios inconvenientes para la correcta representación de una microestructura; los más relevantes son: (i) todavía carece de una cinética adecuadamente parametrizada, y por el método utilizado para minimizar la energía total (por muestreo local) el sistema podría quedar atrapado en un mínimo local, lejos de su estado de equilibrio y este es uno de las principales debilidades del enfoque clásico, porque el estado de mínima energía para el modelo es un dominio único; (ii) el modelo básico no tiene una forma de controlar las distribuciones de tamaño y forma, lo que hace imposible estudiar las propiedades mecánicas del agregado, que es uno de los principales desafíos en ingeniería [232, 233].

Teniendo en cuenta todo lo mencionado, aún no se ha establecido una descripción acertada y concluyente, principalmente porque todavía no se dispone de una respuesta correcta para probar la validez de las predicciones teóricas y la mayoría de los modelos solo incluyen la migración de GB como interacción principal, dejando de lado aspectos como la rotación de grano [234], y los posibles fenómenos de coalescencia a pesar de una cantidad significativa de estudios dedicados a la observación y caracterización de agregados poligonales. Es así como el desarrollo y evolución de microestructuras policristalinas se describe comúnmente en términos de migración de límites de grano. Sin embargo, tales microestructuras también pueden, en principio, evolucionar por rotación de grano. Dado que el exceso de energía de un cuerpo policristalino es el producto del área del límite del grano y la energía del límite del grano, puede realizar un movimiento del límite para reducir su área (migración del límite impulsado por la curvatura) o la rotación del grano (suponiendo que las energías del límite no son uniformes). De hecho, se han hecho varias observaciones experimentales de rotación de grano y se han propuesto teorías de evolución de la microestructura basadas en el fenómeno.

En el presente capítulo, informamos los resultados de una serie de simulaciones sobre la evolución del sistema debido a fenómenos combinados de migración simultánea de límites de grano y la rotación de grano que induce coalescencia de dominios vecinos. La existencia de rotación durante la evolución microestructural se informó por primera vez a partir de las observaciones del crecimiento de subgranos que dio lugar a la coalescencia [235]. Li [236] formuló la tasa de rotación de grano

en términos de un modelo de dislocación en el que el espaciado entre divisiones se desarrolló a través de un movimiento de dislocación no conservativo, lo que resultó en la eliminación del límite. Este análisis se basó en el modelo Read-Shockley para la dependencia de la energía del límite del grano y el ángulo de misorientación para ángulos bajos. Así, implementamos una extensión 2D del modelo modificado de Q -Potts en el que incluimos penalidades energéticas logradas mediante la adición de dos restricciones elásticas. Además, también proporcionamos una descripción teórica completa de los agregados poligonales y los resultados de las simulaciones se cuantificaron y se contrastaron experimentalmente, así como también nos permitió predecir y tener control sobre la microestructura final. Nuestros hallazgos proporcionan un enfoque mejor elaborado sobre la forma correcta de capturar la microestructura de estructuras poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación en régimen elástico.

4.2. Metodología

Se realizaron cinco simulaciones replicadas y se promediaron para las estructuras generadas de manera aleatoria; cada una incluía distribuciones de tamaño del agregado, lados de grano, distribución de ángulo de misorientación (lo que nos permitió determinar el estado estable del proceso) y parámetros para la minimización de energía. Las simulaciones se realizaron en una red cuadrada que representa $500 \times 500 \mu\text{m}^2$ con un espaciado regular (resolución) igual a $1.25 \mu\text{m}$ con condiciones de contorno periódicas. La resolución de la red se determinó a partir de una serie de pruebas de independencia de malla basadas en la respuesta promedio del tamaño de grano y todo el sistema se enfrió exponencialmente desde una temperatura superior a la temperatura de transición T_{tr} a una temperatura inferior a T_{tr} (lo que define la temperatura en la que las propiedades físicas del cristal cambian repentinamente) en varios pasos. El tamaño de los granos se definió mediante tres métodos diferentes: a partir del cálculo del radio del círculo equivalente, $r = (A_{grain}/\pi)^{1/2}$. Usando la ASTM E112-13 y, finalmente, el tamaño promedio ($\langle d \rangle$) donde se midió el tamaño del eje mayor (d_{max}) y el tamaño del eje menor (d_{min}) de cada grano y se promedió de cada grano usando la media aritmética de Feret. Los histogramas de tamaño de grano normalizados en frecuencia (donde $\langle d \rangle$ denota el diámetro de grano promedio) se construyeron utilizando un ancho típico (20).

La confiabilidad estadística de las distribuciones calculadas se evaluó y luego se comparó con los resultados de las distribuciones obtenidas de los datos experimentales para un acero inoxidable austenítico AISI 304 que fue tratado térmicamente para obtener distribuciones de tamaño de grano con 3 diámetros medios diferentes: $20 \mu\text{m}$, $30 \mu\text{m}$ y $40 \mu\text{m}$. Usando el software ImageJ v.1.50b, el plugin plot profile, fue posible obtener un gráfico bidimensional de las intensidades de píxeles a lo largo de una línea dentro de cada microestructura, donde el eje x representa la distancia a lo largo de la línea y el eje y es la intensidad de pixel. Luego, se correlacionó través de transformada de Fourier inversa la señal entre AISI 304 y los resultados del modelo.

Con el fin de garantizar la minimización completa de la energía y la obtención de una microestructura con características controladas, incluimos en el desarrollo del proceso mecanismos de rotación-coalescencia directamente en el muestreo del Monte Carlo, de la siguiente manera: (i) en lugar de seleccionar un solo punto en la GB, seleccionamos un grano k y proponemos una rotación en cada uno de los ángulos de Euler. Si el CO del grano k^{th} coincide con algún grano vecino, se produce la coalescencia, ya que esto implica que tienen el mismo ángulo de misorientación. (ii) de manera aleatoria, elegimos un grano k y un grano l , y proponemos una rotación en el CO en cada ángulo de Euler. La vecindad de cada grano se verifica por separado para verificar la coalescencia entre los granos adyacentes (2 o más), de no proceder la coalescencia, los demás mecanismos siguen igualmente activos. Se implementó un esquema Metropolis para generar una cadena de CO de Markov. En particular, las actualizaciones de ensayos aleatorios del CO local y las rotaciones se proponen y aceptan de acuerdo con los criterios de Metropolis. Una cadena de Markov de estas configuraciones se construye proponiendo transiciones entre una configuración antigua y una nueva con probabilidad $P(old \rightarrow new)$. Las transiciones de prueba se aceptan con probabilidad $P(old \rightarrow new) = \min [1, \exp(-\beta\Delta\mathcal{H})]$, donde $\beta^{-1} = \gamma T$ y $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}_{new} - \mathcal{H}_{old}$ es la diferencia de energía libre entre las configuraciones nueva y antigua. Si la diferencia de energía $\Delta\mathcal{H} \leq 0$, se aceptan los cambios en el CO de los granos.

Para evaluar la potencial aplicación de las estrategias desarrolladas se contrasta con una aplicación importante en el área de la metalurgia física. La comparación con microestructuras obtenidas por tratamiento térmico de aceros inoxidables 304, con estructura austenítica, con alto grado de correlación entre lo experimental y lo simulado, lo que ilustra la posibilidad de manipular los parámetros de ajuste del modelo para obtener los parámetros de cualquier otro material poligonal. Para dilucidar la concordancia entre los resultados obtenidos a través del modelo computacional propuesto y el comportamiento de los agregados poligonales convencionales, utilizamos un acero inoxidable austenítico AISI 304 (barra redonda de 3/4 de pulgada - dureza 270 HV), que muestra una estructura policristalina. Diferentes muestras fueron tratadas térmicamente en un horno eléctrico al aire a 1000, 1050 y 1100°C respectivamente, durante 10 minutos y se enfriaron rápidamente en agua para lograr tres microestructuras diferentes. Cada muestra se preparó siguiendo un procedimiento de pulido estándar y el pulido fino con una suspensión de diamante de $1\mu\text{m}$ y una suspensión de alúmina de $0,03\mu\text{m}$ sobre un paño de microfibras. La microestructura se reveló utilizando ataque electroquímico utilizando una solución de 65% HNO_3 , con una densidad de corriente entre 0.04-0.06 A/cm^2 y un voltaje entre 1.5 y 2.0 V DC, con un cátodo de titanio de alta pureza; el tiempo de ataque varió entre 180 y 300 segundos dependiendo del tamaño medio del grano.

Las micrografías se obtuvieron utilizando un microscopio óptico Nikon Eclipse LV100; se implementó un sistema Automatizado de Análisis Digital de Imágenes (ADIS) para medir la distribución del tamaño de grano de cada muestra usando el software ImageJ v.1,50b. El reconocimiento de las estructuras poligonales en las secciones pulidas permitió la identificación de ~ 2500 granos por sección con un intervalo de confianza del 95 %, lo que garantizó la confiabilidad de los resultados con enfoque estadístico. Finalmente, se utilizaron variables como el área, perímetro, diámetro

de Feret, forma y circularidad para evaluar las características de las estructuras obtenidas así como las distribuciones del tamaño de grano.

4.3. Formulación del modelo

El objetivo de esta sección es diseñar un modelo que permita obtener estructuras similares a las del proceso de crecimiento de grano centrándose en la migración de los límites de grano, en conjunto con otros mecanismos de evolución, para reducir la energía general del sistema. Los detalles en esta sección proporcionan una guía para la modificación y desarrollo del modelo. La fuerza motriz para el crecimiento del grano es la minimización de la energía libre del sistema. Cada límite tiene una energía positiva, por lo que se necesita un modelo en el que la energía se reduzca si se elimina o reduce un límite. Ya se ha presentado el modelo de Potts, clásico, que tiene esa propiedad, similar a el modelo de Ising, en el que un sistema de giros en una red cuadrada, con dos regiones, una en la que todos los giros tienen un valor de $+1$ y otra en la que todos los giros tienen el valor de -1 , donde hay un límite paralelo al eje x entre las dos regiones, por lo que la energía del modelo de Ising (con campo magnético aplicado es cero) puede ser descrita fácilmente.

Se podría argumentar que las simulaciones de Monte Carlo no ofrecen ventajas sobre técnicas como dinámica molecular, porque tienen la desventaja de la falta de información dinámica. Para los sistemas atómicos con potenciales a partir de los cuales se puede derivar fácilmente la fuerza, es en gran medida, un punto de vista válido. Sin embargo, si uno está interesado en la estructura y la termodinámica, entonces Monte Carlo es una opción razonable. Las simulaciones de Monte Carlo también se extienden fácilmente a sistemas moleculares o poliméricos. En general, es más fácil extender Monte Carlo que dinámica molecular a otros conjuntos. Todo lo que uno necesita es una expresión de la energía del sistema en el nuevo conjunto, donde en dinámica molecular, los términos artificiales que definen la energía y la dinámica de las restricciones externas deben agregarse al Hamiltoniano.

Hay varios tipos de problemas para los cuales el método de Monte Carlo es uno de los mejores enfoques. Los modelos de espín, como el modelo de Ising, no son susceptibles de simulaciones de dinámica molecular. De hecho, cualquier sistema descrito por un Hamiltoniano en el que no hay fuerzas fácilmente definidas debe modelarse con el método de Monte Carlo. Debido a que solo se necesita la energía, el método de Monte Carlo es particularmente adecuado para el uso con modelos basados en variables colectivas, por ejemplo, los modelos de espín para el crecimiento de grano. El Hamiltoniano se simplifica en sistemas en los que la energía potencial depende solo de las coordenadas, de la energía cinética y del momento, sistemas Newtonianos. En este caso, el Hamiltoniano es simple; es sólo la suma de las energías cinéticas más potenciales para un sistema de N partículas. El funcional desarrollado en esta propuesta (Eq.(4-1)), y representado esquemáticamente en las Figuras 4-1 y 4-2, se utilizó para capturar la microestructura en agregados poligonales,

con orientación cristalográfica (CO) inicial de 10^4 , la cual representa los tres ángulos de Euler ϕ , ψ y ϵ de un conjunto de granos particular. El Hamiltoniano general, en unidades adimensionales, se define como la suma de las contribuciones de la siguiente manera:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{nn} \widehat{\gamma}_{ij} (1 - \delta_{ij}) + \sum_{k=1}^{grains} \widehat{\lambda}(s_k) (s_k - S_T)^2 + \sum_{k=1}^{grains} \widehat{\sigma}(v_k) (v_k - V_T)^2 \quad (4-1)$$

la primera parte del funcional considera la migración de la GB a través de la diferencia de energía entre dos granos adyacentes, con diferente orientación cristalográfica a través de la ecuación de Read-Shockley (Eq.(4-2)) en la que γ_{ij} representa la energía de deformación asociada con la densidad de dislocaciones de bajo ángulo

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} \gamma_0(\theta_{ij}/\theta_{cr}) [1 - \ln(\theta_{ij}/\theta_{cr})] & \theta_{ij} \leq \theta_{cr} \\ \gamma_0 & \theta_{ij} > \theta_{cr} \end{cases} \quad (4-2)$$

donde $\gamma_0 = \mu b/4\pi(1 - \nu)$ es la energía en un ángulo crítico θ_{cr} (15° para todas las simulaciones); μ es el módulo de corte (86 GPa); b es el vector de Burger (0.3 nm) para una familia de direcciones estándar; ν es la relación de Poisson (0,33) para AISI 304. En este estudio, todo el rango de orientación cristalográfica tendrá valores positivos. En nuestro modelo, como en el enfoque clásico, la probabilidad de aceptar un movimiento propuesto, con una movilidad que es una función de orientación cristalográfica y sigue una descripción Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov y es una función de temperatura. Además, utilizando dos restricciones elásticas (segunda y tercera parte del funcional) y siguiendo el trabajo de Weaire & Kermode [83,84], estas penalidades se adicionaron a la energía clásica del funcional para reproducir y controlar las características físicas de la estructura del agregado.

$$\lambda(s_k) = \lambda_T + (\lambda_0 - \lambda_T) \cdot \exp[-0,9 (s_k/S_T)^2] \quad (4-3)$$

$$\sigma(v_k) = \sigma_T + (\sigma_0 - \sigma_T) \cdot \exp[-0,9 (v_k/V_T)^2] \quad (4-4)$$

Los términos al interior del funcional son elevados al cuadrado para asegurar que la contribución sea positiva e independientemente de si el grano es más pequeño o más grande que su restricción objetivo. Ambas situaciones deben ser desfavorables con respecto a la minimización de \mathcal{H} para tener granos con el tamaño designado. A medida que la energía de restricción disminuye suavemente a un mínimo, cuando se satisface la penalidad, el esquema de Metropolis dirige automáticamente cualquier configuración hacia la que cumple con el requisito de restricción [237].

Hu [238] propuso un mecanismo alternativo para el crecimiento de subgranos, basado en los experimentos de recocido a temperatura de recocido para aleaciones de Fe-Si. Sugirió que los subgranos

podrían rotar según los procesos de difusión de límites hasta que los subgranos adyacentes tuvieran una orientación similar. Los dos subgranos involucrados se unirían entonces en un subgrano más grande con poca migración de límites debido a la fuerza impulsora que surge de una reducción en las energías de los límites. El proceso se muestra esquemáticamente en la Figura 4-1. Considerando dos límites de ángulo bajo adyacentes, y permitiendo que la rotación se produzca en una dirección tal que aumente la misorientación del límite del ángulo superior y reduzca la misorientación del límite del ángulo inferior. Se puede definir que el cambio en la energía del límite es mayor cuanto más bajo es el ángulo del límite. Por lo tanto, si los dos límites tienen áreas similares, el aumento en la energía del límite es menor que la disminución, existe una disminución general de la energía si la rotación se produce de tal manera que disminuya la misorientación del límite y esto eventualmente llevará a la coalescencia como se muestra en la Figura 4-1F. La evidencia experimental de la ocurrencia de la rotación de subgranos y la coalescencia durante la recuperación se obtuvo a partir de dos tipos de experimentos: observación directa del recocido de láminas delgadas y observación *post mortem* del material recocido.

4.4. Mecanismos de transformación y esquema de muestreo

En nuestro enfoque de simulación, se introdujeron tres mecanismos posibles para evolucionar la microestructura, Figura 4-1. Cuando una GB migra de un grano a otro, la parte del segundo cubierta por el movimiento del límite cambia su orientación cristalográfica a la del primero. Este cambio puede tener lugar por el movimiento individual de átomos que se difunden a través de la GB. En cada caso, el proceso puede acoplarse con o sin rotación de grano. Durante el proceso de engrosamiento, las rotaciones de CO son posibles y pueden conducir a la coalescencia de los granos vecinos al eliminar la GB común entre ellos, lo que proporciona otro mecanismo importante para describir los mecanismos físicos de transformación de la microestructura en sistemas poligonales. Incluso si el mecanismo de coalescencia no avanza, la rotación rígida del grano entero contribuye a disminuir la energía total ya que ésta depende de la orientación entre los granos.

Este tipo de rotación se ha observado experimentalmente en diferentes investigaciones. De esta manera, Moldovan et al., [239] utilizó un enfoque de simulación mesoscópica para estudiar el acoplamiento y la competencia entre la curvatura y la coalescencia por rotación, lo cual indujo el crecimiento de grano en sólidos columnares texturizados. Sugiriendo que cuando el tamaño promedio de grano era más pequeño que un radio crítico, el proceso de crecimiento de grano estaba dominado por el mecanismo de rotación-coalescencia de grano. Por el contrario, si el tamaño de grano promedio fue mayor que el radio crítico, entonces el crecimiento estuvo dominado por la migración de la GB impulsada por la curvatura. Por esta misma vía, [235], demostraron que el proceso de engrosamiento de una microestructura policristalina debido al mecanismo de coales-

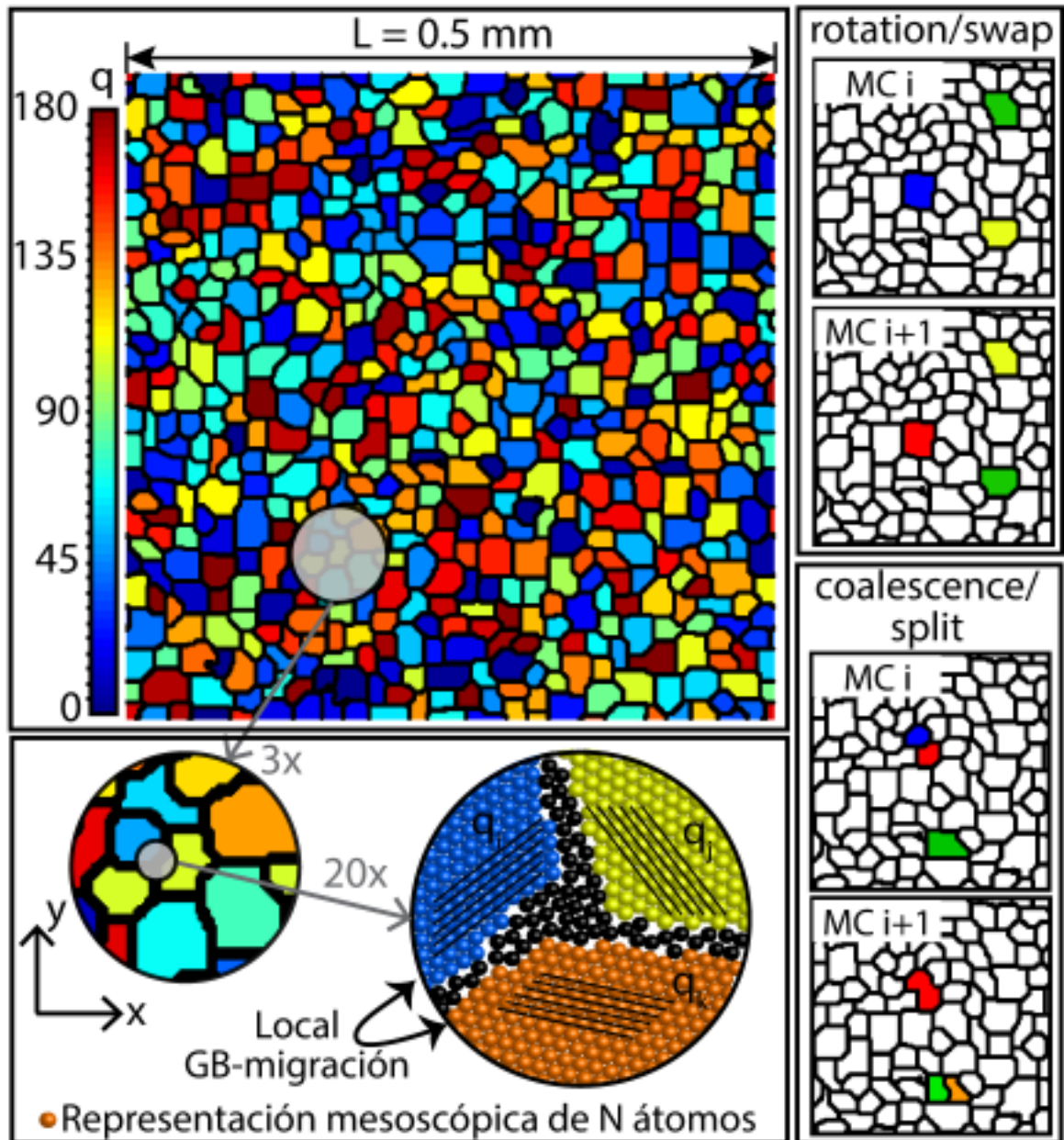


Figura 4-1.: Rotaciones de CO que permiten la coalescencia de los granos vecinos mediante la eliminación de GB comunes entre ellos a través de la migración de la GB de un grano a otro (junto con rotación de grano), la parte del segundo grano es cubierta por el movimiento del límite que cambiará su orientación cristalográfica a la del primero. Fuente propia

cencia de rotación de grano exhibe un crecimiento de la ley de potencia con un exponente de escala universalmente.

Por otro lado, Vuppuluri & Vedantam [240], trabajando con materiales nanocristalinos, encontraron que la rotación de grano era un mecanismo importante para la evolución de la microestructura junto con la migración de límites de grano impulsada por curvatura. Observaron que los granos se unen debido a la rotación y esto proporciona un mecanismo adicional para el crecimiento y concluyen que el problema acoplado fue sorprendentemente más estable que el de crecimiento normal. Rath et al., [241] estudiando el movimiento de GB durante el crecimiento y la recristalización y sus implicaciones en el comportamiento de fluencia sugieren que el proceso de evolución de la microestructura puede ir acompañado de rotación de subgranos o rotación de nano-granos. Indican que la migración de límites se puede lograr mediante un movimiento de dislocación o por deslizamiento. La evidencia fue la verificación de la ley de potencia entre la fuerza motriz y la velocidad GB que se aproxima a la auto-difusión, la cual disminuye al aumentar la fuerza motriz. Hoffrogge & Barrales-Mora [242], investigando sobre el crecimiento de grano en aluminio nano-cristalino mediante simulaciones de dinámica molecular fueron capaces de calcular atributos específicos de granos, como el centro de masa, la orientación promedio y la distribución de la misorientación. Para cada paso de transformación del sistema y de evolución de la estructura, se realizan las siguientes operaciones:

Dinámica para la rotación de grano durante el procedimiento de muestreo

```

1  FOR j = 1 to N DO
2       $\mathcal{H}_i := 0$ 
3       $\mathcal{H}_f := 0$ 
4      seleccionar un grano  $i: i \in [1, \dots, N]$  aleatoriamente
5      seleccionar un grano  $j: j \in [1, \dots, N]$  aleatoriamente
6      FOR para todos los granos no vecinos DO
7           $Q_i \mapsto Q_{i-new} = Q_i \cdot rand()$  and  $Q_j \mapsto Q_{j-new} = Q_j \cdot rand()$ 
8          IF  $\Delta \mathcal{H} < 0$  THEN
9               $Q_i = Q_{i-new}$  and  $Q_j = Q_{j-new}$ 
10              $\mathcal{H}_i := \mathcal{H}_i + \mathcal{H}_0$ 
11             ELSEIF  $\Delta \mathcal{H} \geq 0$  and  $P(\Delta \mathcal{H}) > rand()$  THEN

```

```

12          $Q_i = Q_{i-new}$  and  $Q_j = Q_{j-new}$ 
13          $\mathcal{H}_f := \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_0$ 
14     END IF
15 END DO
16 END DO
17  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}_f - \mathcal{H}_i$ 
18 cambiar valor del sitio  $i$  a  $Q_i$  con probabilidad  $P(\Delta\mathcal{H})$ 
19 incrementar el tiempo  $1/N$  Monte Carlo steps

```

4.5. Metodología de trayectoria microestructural

El enfoque convencional de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) describe la conducta macroscópica de evolución del sistema pero es necesario realizar esfuerzos significativos de mejorarlo, utilizando lo que se ha denominado como metodología de trayectoria microestructural. En esto, se emplean esquemas geométricos más realistas, más complejos, mediante el uso de parámetros microestructurales adicionales en el análisis y, si es necesario, relajando las restricciones uniformes del sistema. Esta aproximación de la trayectoria microestructural permite extraer información más detallada sobre el fenómeno de nucleación y crecimiento que las mediciones experimentales o el análisis original de JMAK no permite, además es una herramienta muy útil para determinar si la nucleación está saturada o no. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que, si bien el enfoque es más flexible que el modelo JMAK, aún se basa en el supuesto de que la distribución espacial de los núcleos es aleatoria y que las tasas de crecimiento son globales en lugar de depender de parámetros locales. Esta aproximación se aprecia en la Figura 4-2.

De acuerdo con la Figura 4-2, durante el proceso de simulación, la energía asociada con la GB γ permanece constante, ya que tiene en cuenta que la movilidad del límite solo depende de la naturaleza del material. A través de la adecuada parametrización de las penalizaciones energéticas ($\lambda(s_k)$ (Eq. (4-3)), $\sigma(v_k)$ (Eq. (4-4))) y el tamaño objetivo impuesto (S_T y A_T) para las restricciones elásticas del funcional, podemos obtener un tamaño medio deseado para cada distribución. Sin embargo, para controlar la desviación estándar de la distribución y permitir el ajuste con los datos experimentales (muestras de AISI 304 tratadas térmicamente), para lo cual ajustamos los valores de λ_0 , λ_T , σ_0 , y σ_T , como se muestra en la Figura 4-2. El formalismo de muestreo de Monte Carlo propuesto en este trabajo permite minimizar la energía total (Eq. (4-1)), y para capturar la estructura de agregados poligonales, la cual se rige por la eliminación del área de la GB (como se

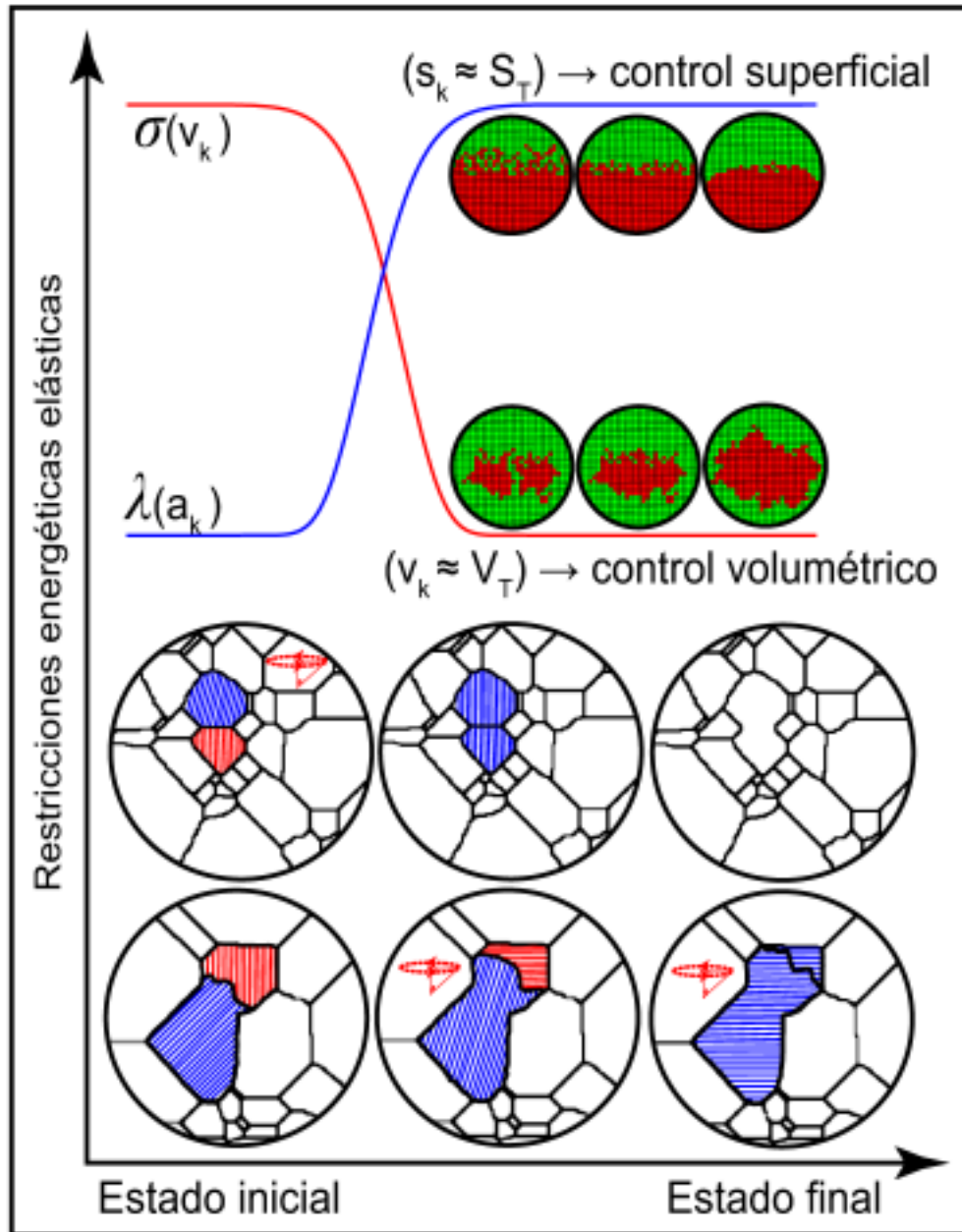


Figura 4-2.: Metodología de trayectoria microestructural para la evolución del sistema en el que primero se garantiza la conservación del volumen del grano y luego se relaja su superficie. El punto de encuentro de ambas curvas es el punto de diseño para el tamaño deseado junto con sus mecanismos de rotación, coalescencia y migración. Fuente propia.

hace en el modelo clásico) [19,208,243,244]. Este nuevo formalismo de muestreo da la posibilidad de emular procesos adicionales a la difusión de GB, tal como la rotación y la coalescencia del conjunto de granos, como medios para controlar el tamaño y la forma de las distribuciones y alcanzar verdaderamente el estado estable del sistema a diferencia del método clásico.

Específicamente, $\sigma(v_k)$ ayuda a regular la conservación de la masa del grano, y $\lambda(s_k)$ controla la forma superficial de cada grano. λ_0 y σ_0 representan el estado de energía base de los granos en la etapa inicial y λ_T y σ_T son la energía de la superficie y de volumen del grano cuando alcanzó el tamaño objetivo. El sistema está impulsado por la minimización de la energía libre funcional, donde la migración de la GB es el mecanismo principal, la cual consiste en un cambio local de CO entre dos granos. Sin embargo, para controlar la distribución de tamaño de la microestructura se debe alcanzar un mínimo de energía global de la energía libre y garantizar que el sistema no quede atrapado en mínimos locales. El muestreo clásico no permite una minimización adecuada de \mathcal{H} , ya que los cambios locales en CO no tienen en cuenta el tamaño y la forma de cada grano, factores que se consideran en nuestro modelo.

4.6. Microestructuras desarrolladas y caracterización

La figura 4-3(a-c) muestra la forma de los granos y agregados individuales después de 10000 MCS con (a) $\langle d \rangle = 20\mu\text{m}$ (ASTM 8), (b) $\langle d \rangle = 30\mu\text{m}$ (ASTM 7) y (c) $\langle d \rangle = 40\mu\text{m}$ (ASTM 6) de tamaño medio de grano. Las microestructuras simuladas están compuestas por cristales equidimensionales representados por una estructura poligonal; cada grano varía en tamaño y forma permitiendo una distribución. Las microestructuras mostradas en la Figura 4-3(a-c) son poligonales (típicamente de 5 o 6 lados) con GB rectos o ligeramente curvadas; las GB se encuentran en uniones triples que definen ángulos dihedros (Figura 4-5), lo que indica un acercamiento al equilibrio estático local entre las tensiones interfaciales. Las microestructuras presentadas en la Figura 4-3 (derecha) son de una AISI 304 tratado térmicamente, con el mismo tamaño de grano para comparación. Estas estructuras son especialmente características de formaciones geológicas como granulitas y eclogitas.

Los granos individuales exhiben formas de cristales euhedricos con caras completamente desarrolladas. Adicionalmente, el ajuste de las estructuras desarrolladas y su comparación con los datos experimentales es notable, todas las distribuciones de tamaño (Figura 4-4) fueron equi-granulares, con una razón de Feret de $\sim 0,8$ con un tamaño aproximadamente igual. Los agregados poligonales, con diferentes distribuciones de tamaño de grano, obedecerán ligeramente las formas de la relación Hall-Petch. En este sentido, Kurzydowski et al., [245] han estudiado este problema de aproximación y usando pulvi-metalurgia para hacer muestras de aluminio con diferentes distribuciones de tamaño de grano lograron demostrar que tamaños medios diferentes muestran, diferentes comportamientos frente a una carga mecánica aplicada, caso esperado para nuestro sistema. San-

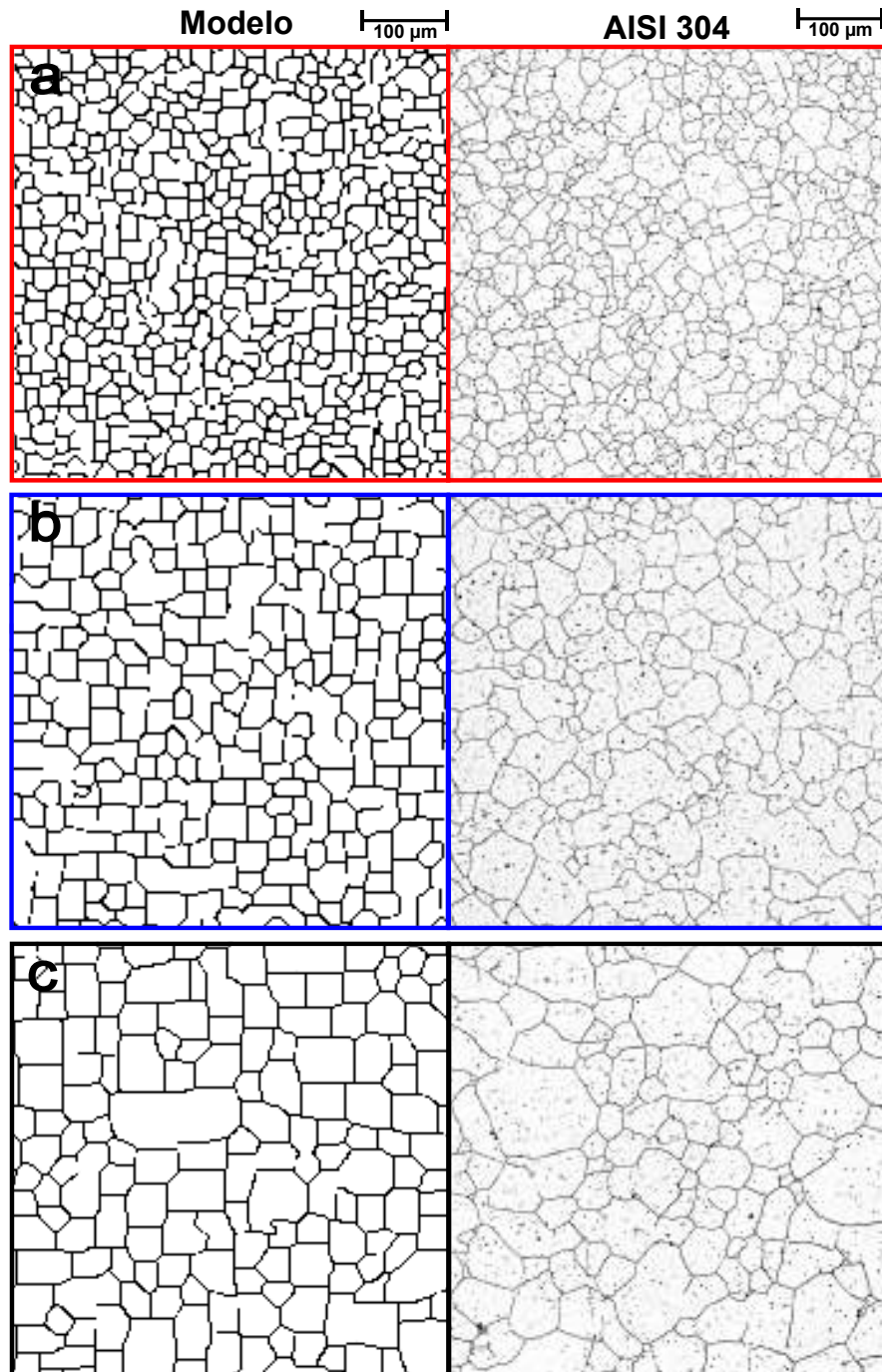


Figura 4-3.: Microestructuras después de 10000 MCS. En la izquierda: (a) $\langle d \rangle = 20\mu\text{m}$, (b) $\langle d \rangle = 30\mu\text{m}$ y (c) $\langle d \rangle = 40\mu\text{m}$ de tamaño medio de grano. Microestructuras de AISI 304 tratadas térmicamente se muestran con el mismo tamaño de grano para comparación. Fuente propia.

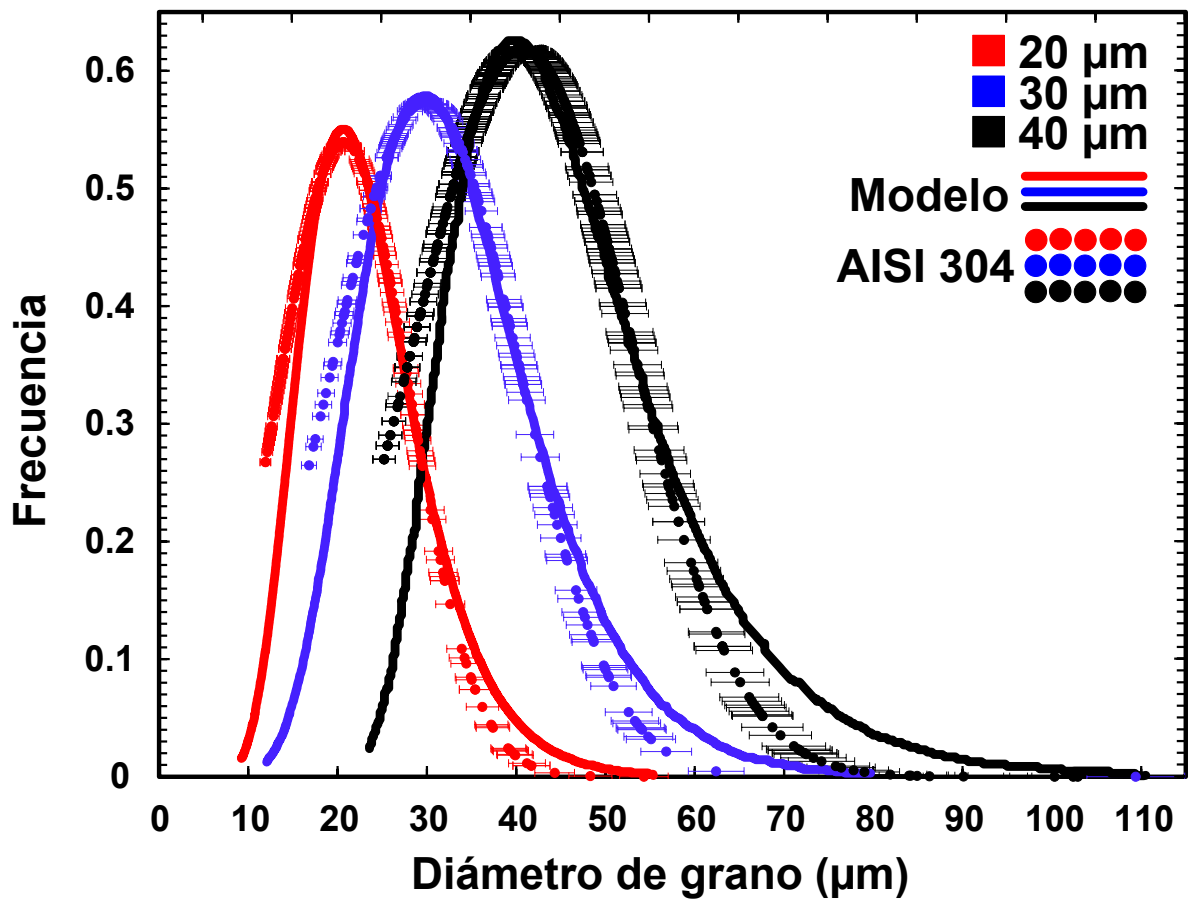


Figura 4-4.: Comparación, entre el modelo y muestras de acero inoxidable, de las distribuciones de tamaño de grano obtenida luego que el proceso está equilibrado (línea continua - modelo) y las mediciones para AISI 304 (línea de puntos). FUente propia.

ders et al., & Cheng et al., [163], estudiaron el comportamiento de muestras de grano ultra-fino de cobre y paladio en función de los parámetros de procesamiento; ambos estudios encontraron que las muestras con microestructuras geoméricamente diferentes tienen respuestas significativamente diferentes a los cambios en el tamaño de grano medio.

La Figura 4-4 permite hacer una primera aproximación a las diferencias geométricas entre los tres grupos de agregados. Como se espera de estos resultados, para un tamaño de grano medio dado, las muestras que tienen distribuciones de tamaño relativamente extendido, Figura 4-3C con $\langle d \rangle = 40\mu\text{m}$, y, por lo tanto, poblaciones relativamente grandes presentarían una dureza menor que aquellas con distribuciones de tamaño de grano estrechas. La figura 4-6A muestra la dinámica de la trayectoria microestructural de las restricciones de energía (volumen y superficie) en unidades adimensionales; esto permite obtener un tamaño promedio deseado (punto de intersección de la curva de volumen y superficie), así como valores finales que dan control sobre la forma final del grano. La figura 4-6B muestra los resultados de la parametrización para obtener los tamaños promedio y seguir el comportamiento descrito en la Figura 4-2. La figura 4-6B muestra, una vez que se ha alcanzado el equilibrio, la evolución de la superficie de un conjunto de granos para cada tamaño. En la Figura 4-6B se puede ver que los valores de la relación σ_T/σ_0 aumentan linealmente como función del incremento del tamaño de grano medio, pero los valores tomados para la relación λ_T/λ_0 disminuyen linealmente como función del incremento del tamaño de grano medio, definiendo la forma y características principales de la metodología de trayectoria microestructural.

La distribución del tamaño de grano expresada que se muestra en la Figura 4-4 se refiere, convencionalmente, a un conjunto infinitamente grande de granos. A pesar de la gran cantidad de granos en un policristal ($10^6/\text{mm}^3$), donde es probable que no se encuentre ningún grano con un tamaño de grano determinado. Por lo tanto, las distribuciones experimentales de tamaño de grano se representan en términos de histogramas, donde la frecuencia de granos en un intervalo de tamaño dado se representa como un gráfico de barras, para nuestro caso un gráfico de puntos con barras de error. Ni el tamaño de grano promedio ni la distribución de tamaño de grano pueden proporcionar una descripción completa de los agregados poligonales. La morfología y la topología de los granos rara vez se tienen en cuenta, ya que la estereología requiere una laboriosa manipulación de la muestra para obtener una imagen 3D del ensamblaje de los granos. La forma del grano, en términos de elipticidad, o la distribución del número de bordes y esquinas del grano se puede determinar para representar de manera más adecuada la estructura del grano. Sin embargo, debido a los extraordinarios esfuerzos involucrados en obtener esta información de manera experimental, solo se recopila en una necesidad particular, por ejemplo, si la topología de grano juega un papel para un problema en cuestión, como en un tratamiento integral del crecimiento de grano, hoy en día, los potentes sistemas de análisis de imágenes, que permiten el almacenamiento digital de micrografías metalúrgicas, es decir, secciones a través de ensamblajes de grano, están disponibles para facilitar la evaluación estereológica, por lo que nuestro modelo provee una forma simple y rápida de sortear estas dificultades experimentales. La evaluación cuantitativa de microestructuras heterogéneas de secciones 2D es el tema de los libros de texto sobre estereología y sistemas de análisis de imágenes.

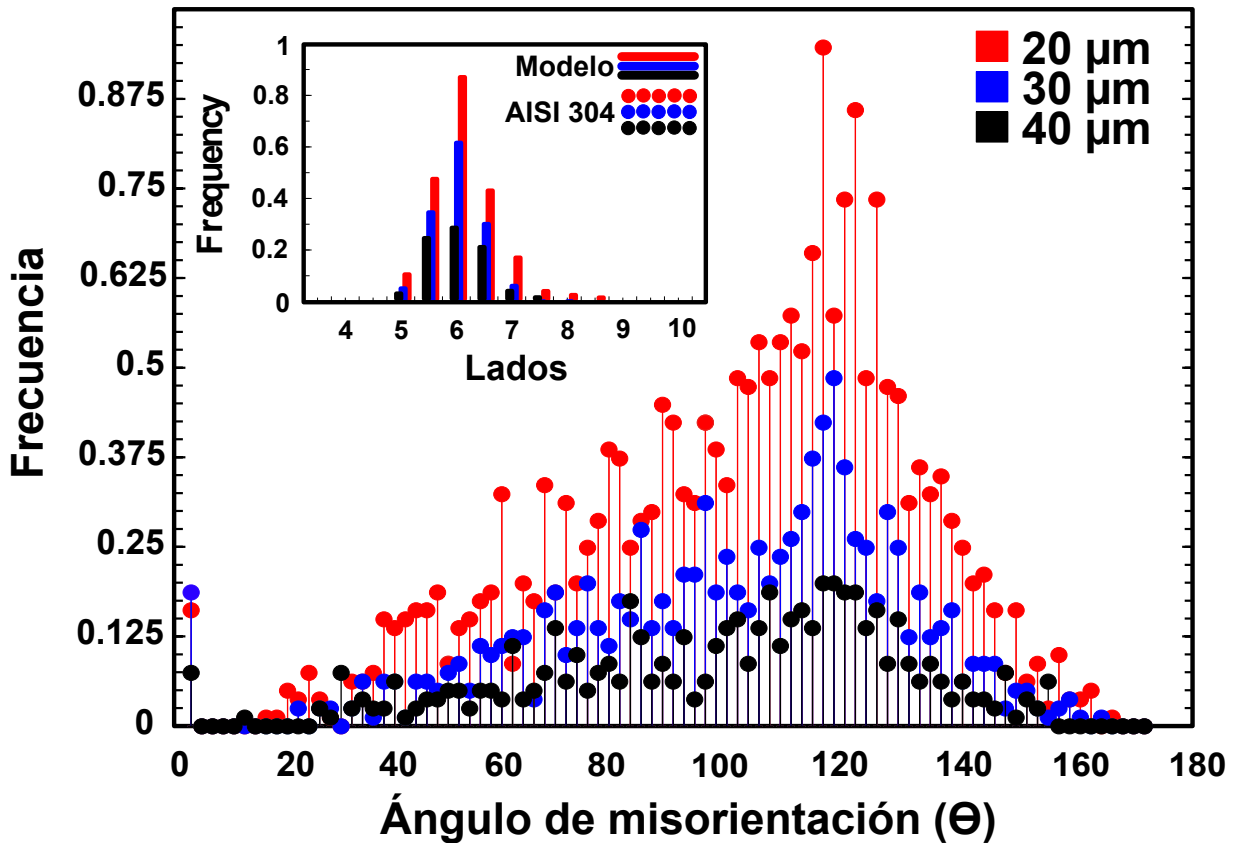


Figura 4-5.: Ángulo de misorientación para las diferentes distribuciones de tamaño de grano en la estructura junto con su distribución de lados (recuadro interno) mostrando que el nuevo modelo logra las configuraciones geométricas y topológicas de sus predecesores. Fuente propia.

En el contexto de los límites de grano en los materiales monofásicos, las áreas de interés primario generalmente incluyen el tamaño del grano, la forma del grano y la orientación espacial de los planos de borde del grano.

Ya que hay una brecha entre lo simulado y lo comúnmente reportado, es una pregunta interesante cómo se comportan los granos referente a su número de lados. De la discusión anterior, parece que tales granos no son capaces de crecer o encogerse, es decir, los granos de las clases topológicas en el área sombreada de la Figura 4-5 serán estables. Esto puede entenderse a partir de la siguiente consideración. Para el valor medio de cualquier ángulo $\theta = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{2}{n}\right)$, cualquier entero n , $\theta(n)$ es exactamente el (medio) ángulo de unión para un polígono de n lados, es decir, $\theta = 60$ para $n = 6$, $\theta = 54$ para $n = 5$, $\theta = 45$ para $n = 4$, $\theta = 67,5$ para $n = 8$, etc. Esto significa que para un entero dado n el ángulo θ corresponde al (medio) ángulo interno de un polígono de n -lados, es decir, los límites son planos y sin curvatura el polígono es estable. El punto importante a considerar es que

el ángulo θ es un ángulo dinámico, es decir, se desarrolla durante el movimiento de los límites que están conectados en la unión triple. Antes de los límites de movimiento en una unión triple, se ajustará θ para alcanzar el ángulo de equilibrio ($\theta = 60$). Por lo tanto, los granos de 6 lados tienen límites planos, los granos con menos de 6 lados tienen límites convexos, los granos con más de 6 lados tienen límites cóncavos. Si se permite que el sistema se mueva, los límites curvos se moverán y ajustarán al valor dinámico, que es menor que 60 para $n \leq 6$ y mayor que 60 para $n \geq 6$. El grano de 6 lados no cambiará ya que tiene límites planos para comenzar, por lo que no hay una fuerza impulsora para el movimiento del límite y, por lo tanto, no hay cambio de θ . Si consideremos un grano de 5 lados bajo la misma condición, es decir, un grano de 4 lados alcanzará límites planos y, por lo tanto, es estable. Antes del movimiento, el grano de 5 lados tiene límites convexos con $\pi/3 = \theta$ en las uniones. El arrastre de la unión triple cambiará el ángulo a $\theta = \pi/4$. En correspondencia, el ángulo $\theta = \pi/4 = 45$ es más pequeño que el ángulo de unión para un grano de 5 lados con límites planos. Durante el cambio del ángulo de inicialmente $\theta = 60$ a $\theta = 45$ para el evento dado, el ángulo pasará a través de $\theta = 45$, donde los límites se vuelven planos y la fuerza motriz cesa. La configuración estará bloqueada. El ángulo de unión puede volver a $\theta = 60$ para establecer el equilibrio estático en la unión, pero esto hará que el límite sea convexo y hará que el ángulo de unión vuelva a su estado previo. En esencia, si el grano de 5 lados alcanzara el ángulo $\theta = 45$, tendría que cambiar la curvatura de convexo a cóncavo. Para que esto suceda, debe pasar a través de una configuración plana, donde la fuerza motriz cesa y el sistema se bloquea.

Lo mismo vale para un grano con más de 6-lados. Consideremos $n = 8$ y un grano de 7-lados. Inicialmente, θ está en equilibrio estático con $\theta = 60$. Los límites son cóncavos. Debido a que $n = 8$, el ángulo diedro del grano de 7-lados cambiará. En $\theta = 64,3$ el grano de 7-lados llegará a una configuración con límites planos. Nuevamente, los límites en el equilibrio estático son cóncavos. Un grano de 7-lados para $\theta = 67,5$ con un correspondiente a $n = 8$ tendría límites convexos. Nunca puede llegar allí, ya que el cambio en la curvatura requiere un límite plano transitorio, donde el sistema se bloqueará, cuando solo la curvatura impulsa el sistema de límites. En resumen, los granos con n -lados mayores a 6 se bloquean y no pueden crecer ni encogerse. Este fenómeno podría ser esencial para comprender la alta estabilidad de las microestructuras de grano en materiales poligonales, específicamente en capas y películas delgadas. El límite entre el crecimiento y la contracción de los granos es el valor singular $n = 6$. Se disocia en un intervalo bastante pequeño. Se espera que tal efecto estabilice aún más la microestructura del grano. Dado que el proceso depende del tamaño del grano, esta estabilización es más pronunciada en sistemas de grano fino, otorgando mayores respuestas mecánicas.

En matemáticas, la transformada de Fourier discreta convierte una secuencia finita de muestras de una función igualmente espaciadas en una secuencia de la misma longitud de muestras espaciadas de la transformada de Fourier de tiempo discreto, el cual es un valor complejo de la función de frecuencia. El intervalo en el que se muestrea es el recíproco de la duración de la secuencia de entrada. La transformada inversa es una serie de Fourier, que utiliza las muestras como coeficientes de señales sinusoidales complejas en las frecuencias correspondientes. Tiene los mismos valores

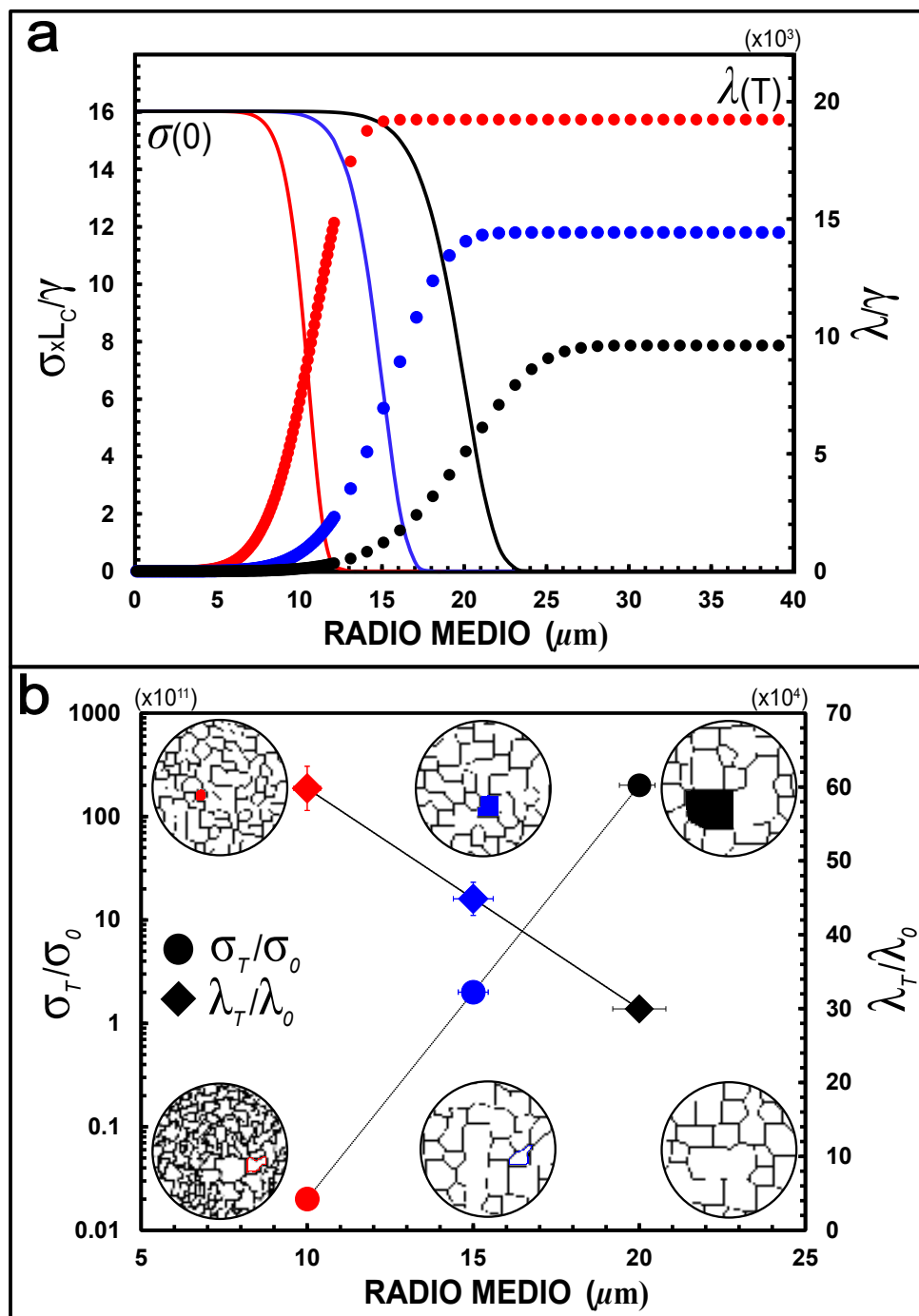


Figura 4-6.: (a) Restricciones energéticas del volumen y la superficie (en unidades adimensionales); (b) muestra los resultados de la parametrización para obtener los tamaños promedio y seguir el comportamiento descrito en la Figura 4-2. Fuente propia

de muestra que la secuencia de entrada original. Por lo tanto, la transformada inversa es una representación en el dominio de la frecuencia de la secuencia de entrada original. Si la secuencia original abarca valores distintos de cero de la función, su valor discreto es continuo (y periódico). Si la secuencia original es un ciclo de una función periódica, como el caso de la señal en escala de grises de las microestructuras, la transformada discreta proporciona todos los valores del ciclo. Este procedimiento es utilizado para realizar el análisis de Fourier en muchas aplicaciones prácticas, como el procesamiento de señales digitales, donde la función es cualquier cantidad o señal que varía con el tiempo; para el análisis de la presión de una onda de sonido, o una señal de radio o lecturas de temperatura diarias muestreadas en un intervalo de tiempo finito. Así como en el procesamiento de imágenes, donde las muestras pueden ser los valores de nivel de grises en píxeles a lo largo de una fila o columna de una imagen renderizada, comparando semejanza de patrones en la imagen; o en la solución de ecuaciones diferenciales parciales de manera eficiente y para realizar operaciones como deconvoluciones.

La figura 4-7 es un criterio adicional de correlación entre los datos experimentales y los resultados de simulación. Los resultados muestran un nivel de similitud superior al 68 %, el cual es constante para todos los tamaños presentados. Esto se convierte en un criterio cuantitativo para comparar el nivel de aproximación del esquema metodológico propuesto. Aumentar el tamaño promedio implica mover la curva de la Figura 4-2 a valores más altos, lo que aumenta la relación σ_T/σ_0 ; adicionalmente, un tamaño promedio más grande significa un área de superficie más pequeña, lo que se traduce en una disminución en la proporción λ_T/λ_0 , como se ve en la Figura 4-6a; este comportamiento inverso puede explicarse por el hecho de que la migración de la GB al principio es mayor que la tasa de relajación, pero en las etapas finales se hace más pequeña debido a un proceso de estancamiento. Como resultado, los granos pueden exhibir formas irregulares, pero al final, la GB está relajada y logra definirse mejor [91]. Los valores objetivo de nuestro modelo permite controlar los valores medios de la distribución y los valores de σ_T/σ_0 y λ_T/λ_0 controle la amplitud de la distribución. La combinación de estos factores permite renderizar una microestructura deseada.

Durante la simulación, la energía asociada con la GB γ permanece constante porque solo se producen límites de grano de ángulo alto y esto sólo depende de la naturaleza del material. A través de las penalizaciones energéticas ($\lambda(s_k)$, $\sigma(v_k)$) y el tamaño objetivo impuesto (S_T y A_T) para las restricciones elásticas de la energía funcional, podemos obtener un tamaño medio deseado para cada distribución. Sin embargo, para controlar la desviación estándar de la distribución y permitir el ajuste con datos experimentales (como los obtenidos para las muestras de AISI 304 tratadas térmicamente), ajustamos los valores de λ_0 , λ_T , σ_0 y σ_T , para que sigan las curvas que se definen en la Figura 4-2. Este proceso nos permite tener en cuenta que, al principio, la tasa de migración de la GB es mayor que la tasa de relajación, pero en las etapas finales del proceso, se vuelve más pequeña debido a un proceso de estancamiento [246].

Como resultado, los granos pueden exhibir formas irregulares durante su proceso de transformación, pero al final, la GB está relajada y bien definido, por lo que la relación entre las tasas de

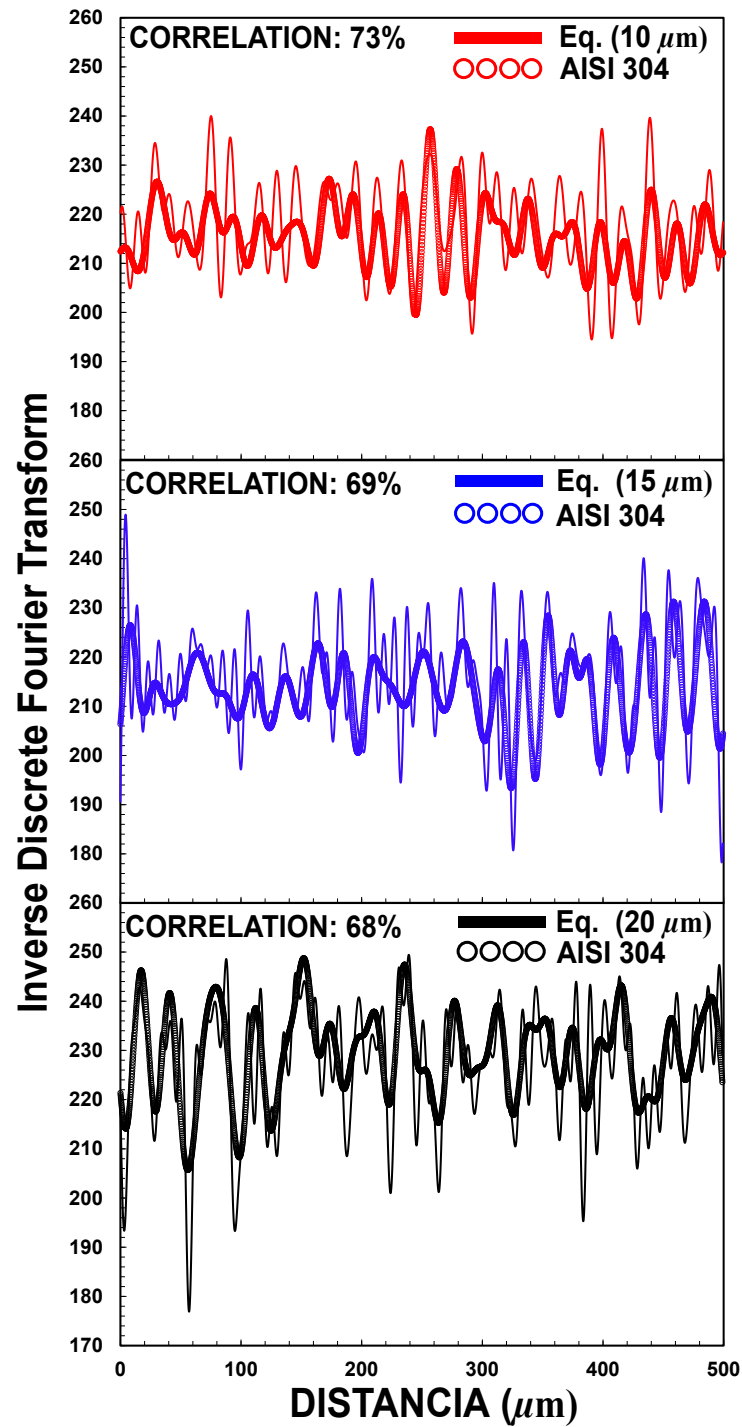


Figura 4-7.: Transformada de Fourier inversa para los resultados de la simulación de $10\mu\text{m}$, $15\mu\text{m}$ y $20\mu\text{m}$ de radio medio y los resultados experimentales con la correlación global calculada entre ellos. Fuente propia.

crecimiento y relajación dependerá del valor de las penalizaciones en ambos casos. Las restricciones energéticas apuntan a regular el crecimiento y la forma de la microestructura a través de la reorganización dinámica de la superficie, que a su vez es causada por la relación entre la tasa de migración de la GB y la relajación posterior a la dinámica JMAK. Quizás la característica más crítica que diferencia las estructuras poligonales de otras microestructuras es el gran número de configuraciones distintas que el sistema puede adaptar. De hecho, muchas de las propiedades únicas de las estructuras de tipo poligonal, como la dureza y la elasticidad, se originan en su entropía de configuración, que es una consecuencia de los grados de libertad que la estructura tiene y tiene implicaciones en la estabilidad de fase. En un sentido para trabajos en espumas pero buscando controlar el comportamiento de manera similar a este trabajo, Wejchert et al., [247] buscaron que el crecimiento de un dominio fuera lento en comparación con la relajación de límites. Agregaron una restricción elástica en el volumen de cada dominio y luego desarrollaron el término objetivo en su hamiltoniano para imponer una tensión superficial efectiva, obligando a los límites a relajarse hacia formas de superficie mínimas. En este trabajo pionero, σ fue la compresibilidad de gas inversa (un valor constante) y a partir de ellos es posible desarrollar que $P \equiv -2\sigma(v_k - V_T)$ es la presión dentro del dominio [247], metodología que nos podría dar luces de propiedades al interior del grano.

Las GB se encuentran en uniones triples que definen ángulos dihedros como se muestra en la Figura 4-5. Este tipo de estructuras es especialmente característica de formaciones geológicas como granulitas, eclogitas, muchos hornfelses y materiales metálicos como aceros inoxidable austeníticos. Los agregados poligonales, con diferentes distribuciones de tamaño de grano, obedecerán ligeramente a las formas de la relación Hall-Petch. Kurzydowski et al., [245] han estudiado este problema de aproximación y usaron pulvimetalurgia para hacer muestras de aluminio con diferentes distribuciones de tamaño de grano. Sanders et al., & Cheng et al., [163], estudiaron el comportamiento de muestras de grano ultrafino de Cu y Pd en función de los parámetros de procesamiento; ambos estudios encontraron que las muestras con microestructuras geoméricamente diferentes tienen respuestas significativamente diferentes a los cambios en el tamaño de grano medio, lo que se espera que sea el comportamiento con las microestructuras logradas en esta parte del trabajo como se verá en el capítulo siguiente. Como se esperaba de estos resultados, para un tamaño de grano medio dado, las muestras que tienen distribuciones de tamaño relativamente dispersas y, por lo tanto, poblaciones relativamente grandes con un tamaño de grano mayor que el promedio, las cuales fueron más suaves que aquellas con distribuciones de tamaño de grano estrechas.

Las amplias distribuciones para todos los conjuntos de tamaños de grano que se ven en la Figura 4-2 indican una anisotropía de la energía de GB o la presencia de un arrastre de unión triple, o una combinación de ambos. Para la energía de GB completamente isotrópica y en ausencia de una triple unión, los tres ángulos diédricos deben ser exactamente de 120° [186, 224, 225]. Por otro lado, si las energías de los límites no son iguales, las estructuras geométricas regulares analizadas anteriormente no serán estables y el valor medio de las distribuciones de orientaciones será diferente de 120° [186, 224, 225]. Esto debe compararse con los ángulos en el punto triple

que involucran solo límites de energía más altos. Por razones similares, las energías de la GB de ángulo bajo dependen en gran medida de la orientación y rara vez se organizan a 120° entre sí; esto se opone a lo que sucede en el proceso de recristalización. Para el caso de ángulo bajo, la inestabilidad que resulta de la interacción entre los requisitos de llenado de espacio y las tensiones límite proporcionan la presión de conducción para el crecimiento de subgranos [19].

4.7. Conclusiones

Los resultados sugieren que la estructura poligonal es estadísticamente estable, lo que apoya la idea que ha sido comúnmente conjeturada en estudios de crecimiento de grano con modelos clásicos. Para lograr tal estado estacionario estadístico, la microestructura debe experimentar un crecimiento de grano durante el tiempo suficiente para que el sistema olvide su estado inicial y, adicionalmente, con las modificaciones al esquema de muestreo se logró garantizar que el sistema evolucionó a un mínimo de energía. Las simulaciones son consistentes con la relación von Neumann-Mullins en las que el área de grano incrementa linealmente con el tiempo hasta alcanzar su estado estacionario cuando tiene 6 vecinos, sin quedar atrapado en mínimos locales.

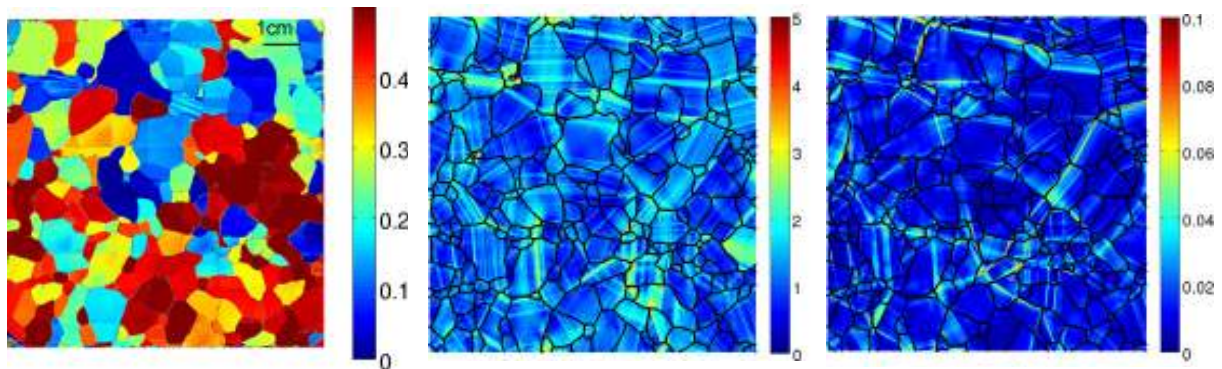
Los resultados que se presentan aquí ilustran una serie de concordancias entre los sistemas bidimensionales y las secciones transversales de sistemas reales, con correlaciones cercanas al $\sim 70\%$. La distribución de lados en las simulaciones se ajusta a lo esperado experimentalmente, al igual que la distribución de tamaños, con ajustes log-normales. Al igual que en el modelo clásico, las secciones transversales de la simulación, contienen una fracción más grande de granos con muchos lados, así como una fracción más alta de bordes largos. Contrario al modelo clásico, la razón de aspecto de Feret es mayor ~ 0.8 , lo que implica una mayor circularidad que los granos en el sistema bidimensional. Esto inhibe el desarrollo de bordes muy largos, granos con muchos, o muy pocos, bordes y granos con relaciones isoperimétricas bajas. Al integrar un sistema de minimización, que incluye mecanismos adicionales de evolución, permite garantizar que el sistema evoluciona hasta un estado en el que un único grano no es el estado más probable como se observa en sistemas reales.

Los sistemas bidimensionales simulados exhiben distribuciones log-normales al igual que las secciones transversales de AISI 304 analizadas. El control sobre estas características no se ha observado anteriormente, por lo que no se dispone de datos suficientes para comparar nuestro modelo y sacar conclusiones definitivas sobre la afectación de los multiplicadores en la dinámica del sistema. Dada la precisión en los datos reportados aquí, las tendencias no pueden atribuirse al ruido estadístico del muestreo y a la estocasticidad del sistema. Los ajustes con los datos experimentales muestran el papel que juega la topología en la evolución de los sistemas bidimensionales, aspectos que son complejos de medir experimentalmente por lo que no son incluidos en simulaciones convencionales, sugiriendo la ausencia de mecanismos adicionales. El volumen de los granos cre-

ce linealmente durante la simulación y se relaciona con su número de caras como lo predice von Neumann-Mullins, descartando nuevamente ajustes con la ley de Lewis o la ley de Feltham

Finalmente, se logró desarrollar y parametrizar un funcional fenomenológico de energía libre, informado teóricamente a través de su ángulo de misorientación, permitiéndonos reproducir microestructuras de materiales poligonales, así como estrategias para el proceso de solución vía minimización energética a través de simulación Monte Carlo, logrando características topológicas que se observan comúnmente en estos agregados, así como otorgándonos control sobre el tamaño medio y la distribución, habilitándonos como simulador para el diseño y control del sistema. Para lograr estos objetivos, empezamos por implementar una extensión 2D del modelo Q -state Potts modificado, reproduciendo los resultados ya establecidos, pero con la inclusión de penalizaciones energéticas, mediante la adición de dos restricciones elásticas, logramos gobernar y proporcionar una descripción completa de las estructuras. También, logramos cuantificar y contrastar los resultados con datos experimentales. Nuestros hallazgos proporcionan una descripción más profunda sobre la forma correcta de capturar características microestructurales en sistemas poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación.

5. MICROESTRUCTURAS BAJO DEFORMACIÓN ELÁSTICA NO-LINEAL



LA anisotropía de la orientación cristalográfica afecta las propiedades de los agregados poligonales, controlando tanto la respuesta completa del sistema, así como la forma de las distribuciones locales de los campos de esfuerzo/deformación, cuyos valores extremos gobiernan los procesos de falla. En este sentido, y teniendo en cuenta lo ya desarrollado, proponemos un nuevo marco para modelar la respuesta no-lineal de un agregado poligonal bajo un campo de deformación externo, aplicado mediante el acoplamiento de las características microestructurales, a través de un funcional de energía libre, teóricamente informado, acoplado para la solución de los campos de deformación elástica cuya solución se da a través de funciones de base radial no simétrica. Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema y tiene en cuenta, explícitamente, la interacción de corto y largo alcance inducida por la compatibilidad de la deformación y las interacciones elásticas entre el conjunto de granos, así como el efecto de la distribución del tamaño de grano mediante el acoplamiento del tensor de rigidez como función de la orientación del cristal, lo cual permite la evolución del sistema. El modelo es usado para simular la carga de tracción uniaxial en tres microestructuras diferentes, con un tamaño de grano medio bajo condiciones de elasticidad lineal para describir su evolución vía difusión y así dar una primera mirada a procesos de deformación como Creep. Investigamos la respuesta constitutiva del sistema y la comparamos

con la respuesta del medio continuo, con el propósito de comprender el comportamiento mecánico de las estructuras. En una fracción significativa de cristales se encontró que el esfuerzo de Von Mises, a lo largo del eje de carga, disminuye durante la prueba de tracción más allá del punto de cedencia del material, pero en algunas ubicaciones, el esfuerzo fue mayor, lo que sugiere posibles puntos de inicio de falla. Esto para sistemas sin textura inicial y en ausencia de maclas, lo que es un comportamiento sorprendente. Se muestra que los cambios complejos de la microestructura están controlados por la anisotropía de la orientación cristalográfica y la vecindad inmediata del grano, particularmente aquellas adyacentes a lo largo del eje de carga.

5.1. Introducción

El enfoque convencional para describir la respuesta mecánica de una estructura poligonal bajo una carga específica es usar teoría mecánica del continuo. Este campo asume que las estructuras constitutivas son homogéneas y, en la mayoría de los casos, isotrópicas, sin considerar explícitamente las inhomogeneidades de los límites de grano y la distribución de las orientaciones locales de los granos. Como aproximación para describir el proceso de deformación en muchos materiales, se considera que la evolución de la microestructura se logra mediante un gran número de procesos en la escala de granos individuales [248–251]. Estos procesos involucrados dependen de factores tales como forma, distribución del tamaño medio de grano, orientación preferencial y en controles externos, aspectos tales como temperatura, presión, distribución diferencial de esfuerzos y tasa de deformación impuesta externamente [251]. Estos procesos modifican drásticamente la respuesta mecánica, que a su vez se ve afectada principalmente por su microestructura [252]. Un agregado poligonal es una estructura policristalina que tiene diferentes orientaciones cristalográficas y cuyas propiedades mecánicas dependen en gran medida de estas características, lo que muestra una fuerte influencia de la heterogeneidad del sistema sobre la distribución de los esfuerzos, en los mecanismos de disipación de energía posibles y en la estimación del comportamiento [253–255]. Uno de los principales desafíos teóricos y computacionales es comprender cómo se distribuyen las deformaciones debido a una carga externa aplicada a través del conjunto de granos y cómo esta distribución influye en el módulo elástico promedio del material [256, 257].

Las descripciones de la respuesta mecánica en régimen elástico lineal, donde el deslizamiento ocurre a lo largo de los planos paralelos dentro del cristal, debido a los movimientos preferenciales de las dislocaciones, no son significativos, si la temperatura es baja en relación a la temperatura homóloga, en la distribución de la orientación en función con la carga [258–260]. Sin embargo, para los agregados poligonales, que están sometidos a condiciones de alta temperatura, los mecanismos convencionales como la difusión son relevantes, incluso en ausencia de efectos plásticos [261–263]. Uno de los mecanismos importantes de evolución surge debido a los procesos de rotación y coalescencia de dominios vecinos durante la deformación [261–266]. Por lo tanto, un marco teórico que combine las propiedades elásticas del sistema y tenga en cuenta explícitamente

la interacción de largo alcance inducida por la compatibilidad de la distribución de los esfuerzos entre el conjunto de granos, la anisotropía de orientación cristalográfica y el efecto de la distribución del tamaño de grano es esencial para describir la respuesta global sistema. Por lo tanto, es esencial tener cierta comprensión de la conexión entre los procesos. Es en este punto donde muchas de las aproximaciones se separan de los resultados experimentales, ya que la compleja geometría del agregado poligonal y las interacciones elásticas de largo alcance entre el conjunto de granos a menudo son difíciles de considerar en los métodos tradicionales. Aquí, el principal problema de encontrar las propiedades efectivas de las estructuras es que el campo se ha estudiado utilizando técnicas de promediado [267–269] y estos enfoques sólo son capaces de proporcionar propiedades promedio pero no dan información coherente para las distribuciones.

Los efectos que se producen en la microestructura debido a los procesos de deformación elástica (condiciones no lineales) se han estudiado a través de unos pocos modelos [270–274]. Un enfoque adicional utilizado para estudiar los procesos de deformación mecánica en agregados poligonales son las simulaciones atomísticas, cuyo alcance se ve limitado a granos de tamaño nanométrico o solo conjuntos de unos pocos granos [275], lo que implica que la simulación de estructuras masivas, a través de potenciales inter-atómicos, requiere enormes capacidades de cómputo y, por lo tanto, un gran desafío al tratar de unir las descripciones a nivel nano- con la respuesta macroscópica del material. Como contra parte, las simulaciones continuas pueden cubrir un rango extendido de escalas de longitud, describiendo las características de la estructura de manera volumétrica, presentan importantes desafíos para comprender el comportamiento mecánico en poli-estructurados, tal como la complejidad geométrica de la red de granos [276–280]. Aunque estos enfoques describen correctamente algunas características del cristal o del sistema completo, los problemas sobre el comportamiento elástico a la escala del grano y el material específico generalmente no se abordan. Estos son resultados específicos para ciertas estructuras y no contienen cantidades medidas experimentalmente como las constantes elásticas y no dan cuenta sobre cómo cambian los módulos con la temperatura. En este sentido, proponemos un nuevo marco para modelar la respuesta no lineal de un agregado poligonal a una deformación externa aplicada mediante el acoplamiento de la evolución microestructural, en dos dimensiones, utilizando un funcional de energía libre teóricamente informado.

Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema como parámetros de entrada y tiene en cuenta explícitamente la interacción inducida por la compatibilidad de la tensión entre el conjunto de granos y el efecto de la distribución de tamaño [281–284], mediante el acoplamiento del tensor de rigidez en función de la orientación del cristal y las interacciones elásticas que permiten la evolución de los granos por una carga externa. Debido a este acoplamiento, la distribución de la deformación en cada grano, así como las orientaciones del grano, pueden cambiar bajo deformación. Esta característica relevante no se tiene en cuenta en los modelos clásicos, los cuales consideran que los granos son estáticos, sistemas creados por teselaciones de Voronoi o por autómatas. En este trabajo simulamos un experimento de carga uniaxial para describir la respuesta no lineal de un agregado poligonal a una deformación externa, en dos dimensiones, y calculamos

la solución de los campos de tensión a través del método de funciones de Base radial no simétricas, determinando la respuesta mecánica en régimen elástico no-lineal con implicaciones en procesos como creep.

5.2. Formulación del modelo

Para las integraciones sobre los cambios geométricos y topológicos en la estructura granular hay tres factores inter-relacionados que pueden ocurrir en combinación; la anisotropía de los esfuerzos en las fronteras, la textura debida la distribución de la orientación del eje del cristal y la distribución no uniforme de la orientación normal de la superficie del grano. En esta sección desarrollamos varios casos para ilustrar la aplicación de los resultados obtenidos en la sección anterior cuando un material es sometido a condiciones de deformación externa. Nos limitamos a considerar el estrés de las fronteras de grano y en cómo éste afecta los flujos difusivos que promueven la migración, así como éste actúa en combinación con los demás mecanismos presentados en la Figura 4-1.

La evolución microestructural se lleva a cabo para reducir la energía libre total. La cual puede incluir la energía libre debido a los grados de libertad debidos a la orientación del agregado poligonal, la energía libre elástica del grano y la energía libre elástica debida a la existencia de un límite de grano (GB), la cual es crucial para describir transiciones estructurales de fase, así como la energía elástica de los campos externos aplicados. En una microestructura coherente, la energía elástica que surge de los desajustes de la red es a menudo comparable al cambio en la energía de interfaz. Por lo tanto, un método eficiente y preciso para calcular la energía elástica es deseable para predecir las evoluciones de la microestructura cuya evolución es dirigida por la minimización de la curvatura. En este sentido, se han desarrollado varios métodos de cálculo para sólidos con una microestructura en evolución, como se han revisado en la introducción. En este capítulo, se propone un método de iteración flexible, fundamentado en los resultados del capítulo anterior, para calcular la energía elástica en un sólido con inhomogeneidad elástica y una distribución espacial arbitraria durante procesos de difusión en estado sólido. Por lo tanto, la aplicación del modelo puede extenderse a campos de investigación completamente nuevos, como el efecto de la energía elástica en la evolución de microestructuras para películas delgadas, sistemas cerámicos y superaleaciones de níquel. Aspectos como defectos estructurales, dislocaciones, límites de grano, grietas e incluso bandas de deslizamiento pueden llegar a introducirse en modelo utilizando su correspondiente descripción.

A diferencia de las condiciones de contorno periódicas en sistemas convencionales, las condiciones de contorno de tensión libre en las superficies de las fronteras de grano aumentan la dificultad para resolver las ecuaciones de elasticidad. Muy pocos métodos numéricos están disponibles o son eficientes. Por ejemplo, en películas policristalinas delgadas sujetas a restricción en el sustrato, Lu & Suo [285] derivaron la solución elástica utilizando funciones de Green, donde las tensiones en

la película delgada son independientes del espesor. Para una película gruesa, con una distribución espacial de deformaciones, Li & Hu et al [286] desarrollaron un método para calcular los campos de deformación elástica con el supuesto de homogeneidad estructural. Aunque este método puede extenderse al caso de la película y el sustrato, es probable que ambos tengan constantes elásticas diferentes, por lo que no puede manejar el problema con la falta de homogeneidad asociada con la estructura. En términos generales, el método de elementos finitos siempre se puede emplear para resolver las ecuaciones de elasticidad para cualquier microestructura y condiciones de contorno dadas, sin embargo, el método no es eficiente para desarrollar microestructuras con geometría y topología controlada. De hecho, el método de iteración desarrollado en este trabajo se puede extender para obtener la solución elástica en una películas delgadas.

El funcional propuesto en este trabajo (Eq. (5-1)) y representado esquemáticamente en la Figura **5-1** se escribe como $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{microestructura} + \mathcal{H}_{grano} + \mathcal{H}_{GB}$. Los primeros tres términos del funcional representan la energía libre debido a los grados de libertad por la orientación del agregado poligonal, \mathcal{H}_{grano} , cuarto término del funcional, representa la energía libre elástica de un grano y \mathcal{H}_{GB} , último término en el funcional, representa la energía libre elástica debido a la existencia de un límite de grano. El Hamiltoniano general, en unidades adimensionales, se define como la suma de las contribuciones de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} = & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{nn} \widehat{\gamma}_{ij} (1 - \delta_{ij}) + \sum_{k=1}^{grains} \widehat{\lambda}(s_k) (s_k - S_T)^2 + \sum_{k=1}^{grains} \widehat{\sigma}(v_k) (v_k - V_T)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \varepsilon^T : \widehat{C} : \varepsilon \\ & + \frac{\delta_{GB}}{2} \sum_{k=1}^N \nabla \theta^T : \widehat{C} : \nabla \theta \quad (5-1) \end{aligned}$$

La introducción y cuantificación de mecanismos para la migración juegan un papel clave en el modelado de la evolución de sistemas poligonales. Por ejemplo, el estudio de las fronteras planares ofrece la ventaja de que la estructura del límite del grano se define de forma no ambigua, mientras que en los límites de grano curvos el carácter del límite cambia con la ubicación. Sin embargo, las fronteras planares no experimentan una fuerza impulsora debido a la curvatura como ha sido el caso durante todo este trabajo. Para ejercer una fuerza motriz, se debe introducir en el sistema un gradiente de energía a través del límite (último término en la Eq. (5-1)). El primer enfoque utiliza la anisotropía de las constantes elásticas que causará un diferencial de energía elástica a través del límite. Un segundo enfoque hace uso de una fuerza tipo Peach-Koehler debido al acoplamiento entre un estado de tensión externa y la microestructura, para finalmente introducir un término de energía en función del volumen del grano.

Para introducir una fuerza motriz elástica, se debe aplicar una tensión a la caja de simulación, lo que causará una diferencia de energía entre los granos. Dicho enfoque se fundamenta en la suposición que los granos del material se comportan elásticamente pero de forma anisotrópica,

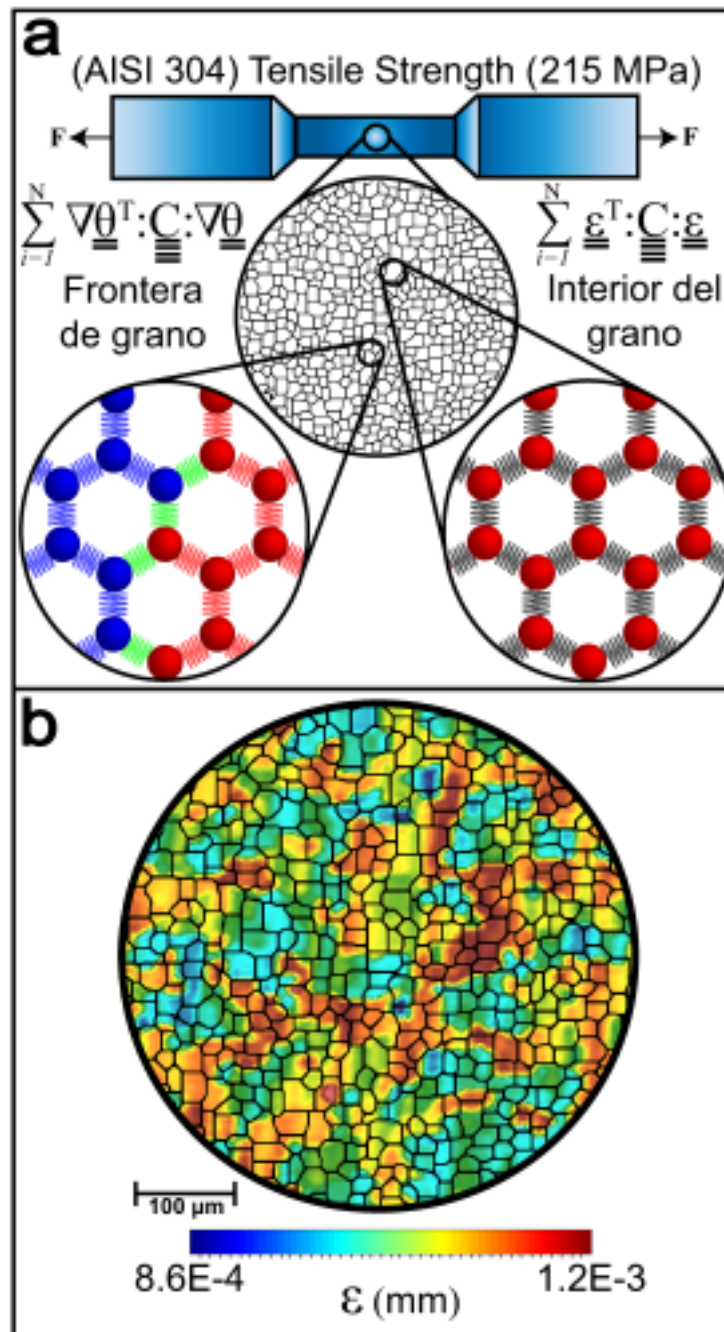


Figura 5-1.: Representación gráfica de la Eq. (5-1). (a) Esquema para estimar la energía debida a la frontera de grano y la energía elástica debida a la estructura interior del grano. (b) Campos de deformación en la microestructura final luego del proceso de minimización a través del formalismo de muestreo utilizado en el que se pondera la influencia de los procesos de rotación/coalescencia. Fuente propia

ya que la orientación determinará la energía elástica de cada grano. Además, solo ciertos estados de tensión darán lugar a una fuerza motriz elástica en la frontera. Debido al gradiente de energía elástica almacenada a través de la frontera, ésta migrará hacia el grano con la energía elástica más baja. La fuerza motriz elástica misma viene dada entonces por la diferencia en la densidad de energía almacenada en los granos debida a su distribución de dislocaciones. A partir de la orientación de cada grano con respecto al sistema de coordenadas de la celda de simulación, se puede derivar la matriz de rotación que relaciona cada orientación, de cada grano, con el sistema de coordenadas principal de la estructura cristalina estudiada. Estas matrices de rotación se pueden usar para transformar el estado de esfuerzos en el sistema de coordenadas principal del grano para calcular la densidad de energía elástica. Por ejemplo, el estado de referencia de un material cúbico en su sistema de coordenadas principal se define por las direcciones del cristal, las cuales están alineadas con el sistema de coordenadas que define las coordenadas de los átomos dentro de la celda cristalina.

Es importante considerar que las simulaciones se pueden realizar controlando la tensión aplicada o la deformación. En algunos casos, es crucial elegir las condiciones de frontera apropiadas para observar la migración continua de la frontera y la evolución del sistema. Desde un punto de vista práctico, las simulaciones controladas por la tensión aplicada son robustas de configurar, ya que la caja de simulación debe permanecer fija para no incurrir en la necesidad de un remallador. Desde un punto de vista físico, las simulaciones controladas por tensión son más favorables, ya que la caja de simulación puede ajustar su tamaño y forma al tensor de esfuerzo externo aplicado. Esta es una característica muy importante para las simulaciones a temperatura finita si se presta atención al hecho de que las fronteras pueden cambiar su estructura y carácter con la temperatura.

Adicionalmente, fuerzas de Peach-Koehler debidas al movimiento de dislocaciones generando estados de estrés internos también pueden ser introducidas para estudiar el efecto de los esfuerzos en la evolución del sistema. Es bien sabido que las fronteras de ángulo bajo están compuestas por dislocaciones discretas. Su espaciado D es grande pero disminuye al aumentar el ángulo de misorientación θ de acuerdo con $\sin(\theta/2) = b/2D$ donde b es el vector de Burgers. Con frecuencia, se supone que las fronteras de ángulo alto tienen una estructura desordenada, pero en principio, cualquier límite de grano puede representarse por una superposición de dislocaciones de límite de grano primario y secundario. Se ha demostrado experimentalmente que las fronteras de ángulo bajo pueden ser impulsados por las fuerzas de Peach-Koehler [287]. Los tres primeros componentes del funcional consideran, al igual que en el capítulo anterior, la migración de la GB a través de la diferencia de energía entre dos granos adyacentes, con diferente orientación cristalográfica a través de la ecuación de Read-Shockley (Eq.(5-2)) en la que γ_{ij} representa la energía de deformación asociada con la densidad de dislocaciones de bajo ángulo

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} \gamma_0(\theta_{ij}/\theta_{cr}) [1 - \ln(\theta_{ij}/\theta_{cr})] & \theta_{ij} \leq \theta_{cr} \\ \gamma_0 & \theta_{ij} > \theta_{cr} \end{cases} \quad (5-2)$$

donde $\gamma_0 = \mu b/4\pi(1 - \nu)$ es la energía en un ángulo crítico θ_{cr} (15° para todas las simulaciones); μ es el módulo de corte (86 GPa); b es el vector de Burger (0.3 nm) para una familia de direcciones estándar; ν es la relación de Poisson (0,33); parámetros utilizados para un AISI 304. En este estudio, todo el rango de orientación cristalográfica tendrá valores positivos. En nuestro modelo, como en el enfoque clásico, la probabilidad de aceptar un movimiento propuesto, con una movilidad que es una función de orientación cristalográfica sigue una descripción Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov, la cual es función de temperatura. Además, utilizando dos restricciones elásticas (segunda y tercera parte del funcional) y siguiendo el trabajo de Weaire & Kermode [83, 84], estas penalidades se adicionaron a la energía clásica del funcional para reproducir y controlar las características físicas de la estructura del agregado.

$$\lambda(s_k) = \lambda_T + (\lambda_0 - \lambda_T) \cdot \exp[-0,01 (s_k/S_T)^3] \quad (5-3)$$

$$\sigma(v_k) = \sigma_T + (\sigma_0 - \sigma_T) \cdot \exp[-0,01 (v_k/V_T)^7] \quad (5-4)$$

Los términos al interior del funcional son elevados al cuadrado para asegurar que la contribución sea positiva e independientemente de si el grano es más pequeño o más grande que su restricción objetivo. Ambas situaciones deben ser desfavorables con respecto a la minimización de \mathcal{H} para tener granos con el tamaño designado. A medida que la energía de restricción disminuye suavemente a un mínimo, cuando se satisface la penalidad, el esquema Metropolis dirige automáticamente cualquier configuración hacia la que cumple con el requisito de restricción [237]. La cuarta parte del funcional tiene en cuenta la energía elástica del grano, la energía potencial almacenada dentro del sistema cuando se aplica una carga, distorsionando su volumen o forma. En este trabajo, asumimos que el sólido está bajo una condición de deformación elástica, es decir, la tensión media de Von Misses $\langle \sigma_{vm} \rangle$ es menor que la tensión de cedencia σ_Y para materiales isotrópicos, C se calcula como $C = \lambda \delta \otimes \delta + 2\mu \mathbf{I}$ donde λ y μ son las constantes de Lamé, las cuales son funciones del módulo elástico (\mathbf{E}) y la relación de Poisson (ν). Como resultado de esta consideración, proponemos un tensor de rigidez en función de la orientación de cada grano con respecto al eje de carga, calculado a partir de la matriz de rotación $\mathbf{J}(\theta)$ (Eq. (5-5)) que depende de la orientación cristalográfica $\hat{C}(\theta) = \mathbf{J}C\mathbf{J}^{-1}$, y se introduce en la energía de tensión para cada grano. El último término de la función es necesario para considerar la influencia de la frontera en el estado de tensión de la microestructura.

$$\mathbf{J}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos^2\theta & \sin^2\theta & 2\sin\theta \cos\theta \\ \sin^2\theta & \cos^2\theta & -2\sin\theta \cos\theta \\ -2\sin\theta \cos\theta & \sin\theta \cos\theta & \cos^2\theta - \sin^2\theta \end{bmatrix} \quad (5-5)$$

Debido a que el límite entre dos granos se caracteriza por una discontinuidad en el orden espacial y en la orientación de los cristales que forman la estructura, el exceso de energía asociado

con la discontinuidad espacial genera pequeñas distorsiones en las redes cristalinas vecinas, lo que produce zonas de tensión y compresión en función del gradiente espacial de la orientación cristalográfica. Por lo tanto, el cambio de orientación en una frontera se trata como una tensión angular y como esta perturbación no implica mecanismos de deformación plástica (movimientos de dislocaciones), podemos considerar un potencial armónico para la energía de tensión angular similar a la generada por el campo de esfuerzos, donde δ_{GB} es el grosor de las fronteras (~ 0.1 nm). Para estudiar el agregado, primero generamos una configuración poligonal inicial resolviendo Eq.(5-1), para un sistema libre de tensión, con una orientación cristalográfica inicial. El estado de esfuerzos resultante σ se calcula a partir de la derivada funcional con respecto al campo de tensión (lineal y angular), lo que lleva a

$$\sigma = \widehat{C}(\theta) : (\varepsilon + \delta_{GB} \nabla \theta) \quad (5-6)$$

La deformación angular $\nabla \theta$ se puede calcular directamente de la microestructura en función de los ángulos de Euler (ϕ , ψ y ϵ) de cada grano. Sin embargo, el tensor de deformación lineal ε es función del campo de esfuerzos aplicados y depende de las condiciones de deformación impuestas sobre el sistema. Para calcular este campo, acoplamos el tensor de rigidez calculado para la microestructura con un balance de momento que no considera los efectos de inercia, es decir: $\nabla \cdot \sigma = 0$, donde σ , el cual se define a través de la ley generalizada de Hooke: $\sigma = \widehat{C}(\theta) : \varepsilon$. Un agregado poligonal sin textura podría describirse macroscópicamente como un sólido elástico isotrópico, caracterizado por un conjunto de parámetros inherentes del material. Sin embargo, en la escala de grano, el comportamiento será, en general, anisotrópico. La ecuación de energía potencial elástica se utiliza en los cálculos de posiciones de equilibrio mecánico, en el cual, la rigidez C es un tensor de 4-rango, una generalización de los módulos elásticos del sistemas y que se transformará teniendo en cuenta la orientación del grano que representan los tres ángulos de Euler.

El tensor de deformación lineal ε se define como función del campo de desplazamiento \mathbf{u} , $\varepsilon = 1/2(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$, donde $\mathbf{u}_z = 0$ bajo el supuesto de una deformación en el plano 2D. Introduciendo la definición de ε en el campo de esfuerzos, el balance de momentum puede expresarse como $\nabla \cdot [\widehat{C}(\theta) : (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] = 0$. De esta manera, el balance se expresa como función del campo de desplazamiento. Esta formulación es directa y ventajosa porque reduce el número de incógnitas (de 9 usando σ a 2 usando \mathbf{u}), y permite el uso de condiciones de contorno simples. En este trabajo, imponemos dos condiciones de contorno diferentes: desplazamiento constante y carga constante. Ambas condiciones se aplican a lo largo del eje-y, mientras que las condiciones de frontera periódicas se establecen a lo largo del eje-x. Para resolver este conjunto de ecuaciones lineales seleccionamos un método de funciones de base radial (RBF), donde el campo de desplazamiento se expresa como una combinación lineal de RBF. Utilizamos N puntos para discretizar tanto los límites como el dominio y las funciones de interpolación de N que llevan a un sistema de ecuaciones de N^2 para los coeficientes de interpolación. El campo de desplazamiento se puede

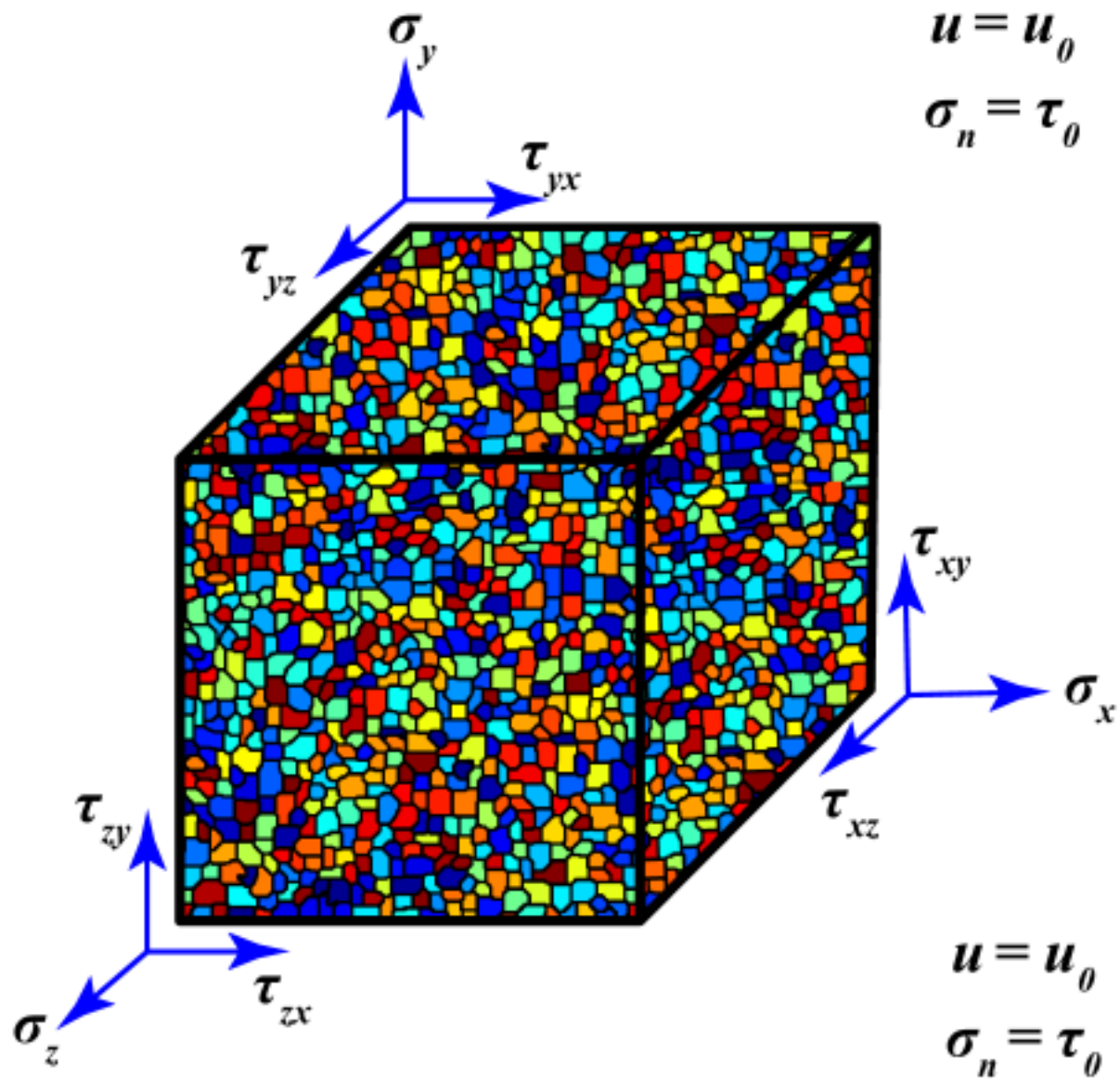


Figura 5-2.: Esquema 3D de un sistema policristalino sometido a deformación. A lo largo del eje-x, consideramos condiciones de frontera periódicas y a lo largo del eje-y podemos considerar dos condiciones de deformación diferentes: (i) desplazamiento constante y (ii) Carga constante. Fuente propia

expresar como

$$\mathbf{u}_i(x) = \sum_{j=1}^N \Phi(r)_{ij} \alpha_j \quad (5-7)$$

donde $\alpha_j = (\alpha_{x,j}, \alpha_{y,j})$ son coeficientes independientes para la interpolación y $\Phi(r)$ es un RBF que depende de la distancia euclidiana entre puntos, r . En nuestro modelo, consideramos una *thin-plate spline* (TPS) generalizada para el RBF, $\Phi(r) = r^{2m-2} \log(r)$, de orden m . El TPS se ha utilizado ampliamente para aproximar los problemas de fenómenos de transporte, como las ecuaciones de difusión-convección y los problemas de superficie libre móvil. En este trabajo, utilizamos un TPS de tercer orden para aproximar el campo de desplazamiento. Después de encontrar \mathbf{u} a través de RBF, podemos calcular directamente el gradiente del campo de desplazamiento, $\nabla \mathbf{u}$, para calcular el tensor de deformación ε . De esta manera, la energía $\mathcal{H}_{grano} + \mathcal{H}_{GB}$ se define completamente y se lleva a cabo un proceso de relajación para asegurar que el sistema alcance una energía mínima después de que la energía de deformación se agregue a la energía de la microestructura.

5.3. Caracterización de las microestructuras desarrolladas

El módulo de Young (E) de un material es un parámetro clave para el diseño en ingeniería. Por ejemplo, para sistemas base-silicio, uno de los materiales individuales más utilizado en sistemas micro-electromecánicos, el cual es un material cristalino anisotrópico debido a su microestructura, donde sus propiedades dependen de la orientación con respecto a la red cristalina, así como la mayoría de materiales policristalinos. Este hecho significa que el valor correcto del módulo, si se analizan diseños diferentes, puede diferir hasta en un 50 % y éste valor está afectado por aspectos como la temperatura y el tamaño de grano del sistema (distribución) [288–290]. Sin embargo, debido a la complejidad microestructural, muchas investigaciones simplifican el comportamiento elástico de estos sistemas poligonales y usan valores promediados, muchas veces inexactos, para el diseño y análisis. En el caso del diseño mecánico de estructuras sometidas a deformaciones elásticas, se presenta un desafío interesante para los ingenieros. Debido a la existencia de fronteras de grano, las cuales son difíciles de describir de manera convencional y que los enlaces mecánicos a microescala se construyen utilizando flexiones elásticas; las ecuaciones de diseño que se usan para describir el comportamiento elástico del sistema, desde la relación de Hooke básica entre la deformación y la carga aplicada hasta aproximaciones para la desviación fuera del plano de placas cuadradas bajo una carga puntual, todas requieren de la asignación de una propiedad efectiva, el módulo de Young o módulo elástico efectivo, para cuantificar el comportamiento elástico del material en cuestión.

Debido a que el silicio convencional es un material anisotrópico, con un comportamiento elástico que depende de la orientación de la estructura, la elección del valor apropiado del módulo puede parecer una tarea desalentadora. Sin embargo, los posibles valores del módulo varían entre 130 a 188 GPa, aunque la elección del valor puede tener una influencia significativa en el resultado del diseño. Este parte de la tesis intenta relacionar el valor del módulo, en sistemas poligonales, con la orientación cristalográfica para una situación dada y para mostrar que, si bien los matices de la mecánica de cristales completamente anisotrópicos se mueven en valores relativamente coherentes, la asimetría de las microestructuras de sistemas poligonales hace que la descripción completa de su comportamiento sea sólo accesible a través de simulación multi-escala como la que se desarrolla a través de la minimización energética de la Eq. (5-1).

En un esfuerzo por minimizar la complejidad microestructural, Petersen [288] proporciona el módulo de Young para una muestra de silicio como $1,9 \times 10^{12} \text{ dinas/cm}^2$ (190 GPa), con una nota al pie que dirige a los lectores a un libro de texto sobre materiales para obtener más información sobre la anisotropía del material. Este valor es el máximo valor posible del módulo para el silicio. Más adelante, en el mismo documento, como ejemplo de un dispositivo hecho de silice, se describe un espejo suspendido con flexiones torsionales. Donde se utiliza el valor de 190 GPa para calcular la frecuencia de resonancia esperada en 16.3 kHz, lo que significa una predicción razonablemente buena cuando se compara con el valor medido de 15 kHz. Desde entonces, numerosas investigaciones han citado y usado este valor, incluso cuando su estructura es extremadamente simple (por ejemplo, una viga). Teniendo en cuenta que el uso del valor correcto del módulo para el ejemplo del espejo torsional, 169 GPa, ofrece una predicción aún más razonable de 15.4 kHz. Este ejemplo plantea un punto importante, si bien la mejora en este ejemplo no es dramática, este tipo de mejoras tendrá un efecto más significativo en el resultado final. Los valores posibles para el módulo de Young, para estos sistemas, oscilan entre 130 y 188 GPa, y los valores para el rango de Poisson entre 0.048 y 0.40. Si bien la simplificación de usar el valor más alto posible del módulo de Young es aceptable con el propósito de introducir el micromaquinado, la creciente disponibilidad de poder computacional, permite incluir más aspectos para lograr mejores diseños. Para describir las propiedades que son dependientes de la orientación de nuestro sistema poligonal es necesario describir la orientación del cristal y su relación con la vecindad del grano, donde los planos y las direcciones cristalográficas están descritos por sus índices de Miller [291, 292].

Los procesos de deformación elástica en estos sistemas implica considerar la relación entre el esfuerzo y la deformación a través de la ley de Hooke, la cual relaciona de manera fenomenológica la rigidez o flexibilidad del sistema con la perturbación ejercida sobre él. Para materiales anisotrópicos, se requiere de un tensor de cuarto rango con 81 términos para describir sus propiedades elásticas al relacionar los tensores de esfuerzo y deformación. Sin embargo, para calcular los campos de esfuerzo/deformación en una dirección arbitraria, el tensor debe rotarse de modo que uno de los ejes esté alineado con la dirección de interés. Si bien se pueden calcular los módulos efectivos que resultan de estas constantes, es necesario medirlos experimentalmente para verificar los resultados de las predicciones e investigar las condiciones en el uso real. Para el caso del silicio, uno

de los materiales más estudiados, Sharpe & Bandi et al., [293, 294] tabulan una gran cantidad de mediciones del módulo de Young en aplicaciones de micro-electrónica. Sus resultados convergen a valores calculados a partir de análisis por propagación de ondas acústicas en las muestras. Aunque los valores experimentales se diferencian de las propiedades del cristal (dimensiones de la muestra inferiores a $0,1 \mu\text{m}$), donde los defectos de la red y los efectos de la superficie dominan la respuesta mecánica de la muestra.

5.3.1. Propiedades elásticas en policristales

La figura 5-3 muestra los resultados para la interpolación del proceso de micro-indentación en un AISI 304, que permite medir la variación del módulo de Young del material, cuyo valor medio comercial es de 230 GPa. Usualmente se reporta que para un Fe-BCC el módulo en la dirección (111) es 270-280 GPa y en (100) es 120-130 GPa, para un promedio del orden de 200 GPa, valor común para el diseño. Las marcas triangulares muestran las marcas de indentación a través de un set de granos, las líneas de color muestran la variación del módulo a través de las fronteras y al interior del grano. En este sentido, y pese a que las constantes elásticas de los sistemas poligonales están determinadas por la unión entre sus átomos individuales, en policristales los valores efectivos de las propiedades están afectados por los granos individuales mediante un proceso de promediado, el cual es el caso en la mayoría de los metales y cerámicos son sistemas policristalinas. Para monocristales las propiedades elásticas están dictadas por la simetría cristalina.

En un agregado policristalino, la deformación de un grano no es independiente de la deformación de sus vecinos. Convencionalmente, Los requisitos de compatibilidad implican uno de los dos siguientes supuestos: (i) la deformación local es igual a la deformación media, es decir que todos los granos se someten a la misma deformación; esto define el valor promedio de Voigt y (ii) el estrés local es igual al estrés medio, es decir que todos los granos están bajo la misma condición de estrés; esto se conoce como el valor promedio de Reuss. La configuración real de esfuerzos y deformación probablemente sea una configuración particular entre estas dos suposiciones.

En los materiales policristalinos, los granos individuales suelen tener una orientación aleatoria entre sí. Sin embargo, con frecuencia, los granos de un material pueden estar orientados preferentemente. Por ejemplo, una aleación de Fe-3 % Si en solución sólida, utilizada para transformadores eléctricos debido a sus excelentes propiedades magnéticas, presentan estructuras granulares, con sus planos $\{110\}$ paralelos y su dirección $\langle 100 \rangle$ a lo largo de la dirección de rolado. Bajo estas condiciones, este material se dice que tiene una textura o una orientación preferida, como es el caso para orientaciones preferidas de los granos que se observan frecuentemente en los alambres trefilados. La compleja interacción entre los mecanismos deformación y evolución microestructural son la base de la gran mayoría de técnicas de procesamiento termo-mecánico para metales. En esta parte del trabajo, presentamos los resultados de las simulaciones de esta interacción, utilizando un modelo de fenomenológico de energía libre que incluye elasticidad lineal anisotrópica.

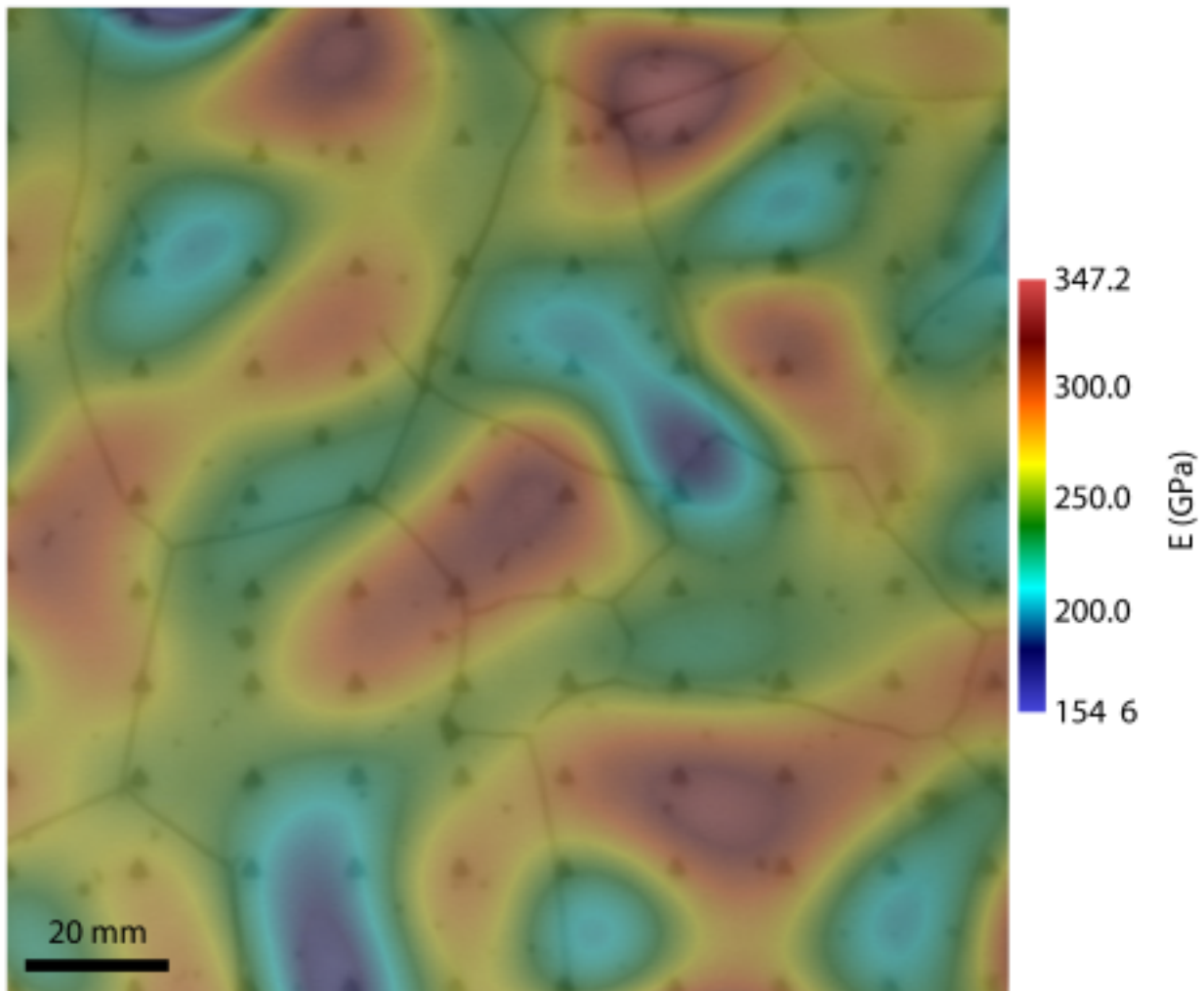


Figura 5-3.: Interpolación para la Variación del módulo de Young en un AISI 304. Usualmente se reporta que para un Fe-BCC el módulo en la dirección (111) es 270-280 GPa y en (100) es 120-130 GPa, para un promedio del orden de 200 GPa, valor común para el diseño.

Este enfoque está acoplado de manera iterativa, de modo que el crecimiento del grano afecta el comportamiento de la deformación, y viceversa. Los análisis de materiales puramente elásticos se presentan a través de simulaciones acopladas de carga estática sobre microestructuras policristalinas.

En el caso elástico, las energías elásticas almacenadas pueden alcanzar valores relativamente altos y la fuerza motriz puede exceder localmente la fuerza motriz de curvatura, haciendo que los límites asuman formas no compactas (onduladas). Estas fuerzas motrices también sirven para acelerar el proceso de evolución del grano. Bajo esfuerzos relativamente bajos, los mecanismos combinados de difusión y evolución microestructural proporcionan un mecanismo de alivio de tensiones que prohíbe la generación de grandes energías elásticas almacenadas; por lo tanto, no se observan desviaciones sustanciales de las morfologías de interfaz compacta, por lo que la cinética de crecimiento no se acelera sustancialmente, dando los primeros apuntes para el estudio de creep.

En este sentido, y sabiendo que los procesos de formación de metales involucran combinaciones de deformación y calentamiento para producir formas y propiedades específicas. Deformar un metal no solo cambia su forma, sino que también cambia su microestructura (por ejemplo, mediante la introducción y/o modificación de su densidad de dislocaciones), lo que promueve la evolución de su microestructura (por ejemplo, a través del crecimiento de grano) y este proceso puede verse afectado por el estado de esfuerzos residuales previo. Por lo tanto, no solo la forma, sino también las propiedades de una pieza metálica formada se pueden adaptar controlando su tratamiento mecánico y térmico, influyendo en la evolución microestructural de varias maneras, pero quizás las más pertinente para el procesamiento es la recristalización y la migración de borde inducida por los esfuerzos en la frontera. La recristalización implica la nucleación y el crecimiento de nuevos granos, libres de dislocaciones de la subestructura de deformación que se forma cuando las dislocaciones se organizan. La migración inducida de fronteras de grano por el gradiente del esfuerzo hidrostático se produce cuando las diferencias en la energía de deformación almacenada a lo largo de un límite de grano hacen que la interfaz se mueva de una manera que no sea la debida a la curvatura de la interfaz.

Cada simulación fue acoplada con el proceso de deformación luego que el proceso controlado de crecimiento de grano terminó. El proceso comienza con un cálculo del campo de desplazamientos del policristal. La red de nodos del límite de grano está constituida por los nodos comunes a lo largo de los límites de grano. Las geometrías del límite del grano y los datos del estado mecánico se utilizan para calcular las velocidades del límite del grano local. Estas velocidades se utilizan para simular un corto período de tiempo del movimiento del límite del grano.

La red de límites de grano evolucionada se remezcla, utilizando los puntos de límite de grano como nodos de semilla, y los datos del estado mecánico se mapean de la malla de la estructura anterior en la de la evolución. La nueva malla se reinserta en el cálculo de FEM y se re-equilibra en un alargamiento fijo utilizando los datos de estado mecánico mapeados. El estado mecánico de equilibrio se utiliza para extraer un nuevo conjunto de velocidades de límite de grano local, y el proceso

se repite con equilibraciones mecánicas consecutivas y Simulaciones de crecimiento de grano a corto plazo. De esta manera, la microestructura del grano afecta el comportamiento de la deformación, que a su vez afecta el crecimiento del grano, y el estado mecánico de la microestructura en evolución se actualiza durante todo el proceso de crecimiento del grano.

5.3.2. Deformación elástica

El procesamiento por el control termo-mecánico es un método ampliamente utilizado para controlar la microestructura y las propiedades resultantes (principalmente mecánicas) en las industrias ferrosas y no ferrosas. El control correcto de la microestructura, además de la selección de elementos de aleación apropiados y composición adecuada, es por lo tanto extremadamente importante, ya que ofrece muchos beneficios potenciales, particularmente si se pueden lograr las mismas propiedades optimizando la microestructura sin la adición de elementos de aleación, especialmente elementos de tierras raras y metales menores. El uso de metales comunes en lugar de elementos raros también contribuye sustancialmente a la conservación ambiental. Para el método de desarrollo acá y según lo logrado anteriormente para el control del tamaño medio, la predicción y el control de la evolución microestructural y las propiedades mecánicas queda dependiendo del conocimiento de la orientación cristalográfica del grano. Convencionalmente, para la fabricación de acero, donde el procesamiento es complejo y evoluciona a una microestructura dinámica, las predicciones convencionales requieren mucho tiempo y requieren mucho esfuerzo, caso contrario de nuestro modelo, donde el control del sistema está dominado por un grupo de parámetros muy pequeño. Además, el control constante es casi imposible. En este punto es donde nuestros resultados sobre procesamiento termo-mecánico ponen los primeros pasos, permitido predecir las microestructuras y las propiedades mecánicas durante procesos de deformación. Los cambios en las microestructuras y cómo estas afectan la distribución del esfuerzo Von Mises promedio se aprecian en la figura 5-4, donde a partir de unas propiedades mecánicas específicas para una AISI 304, se predice su evolución en función de los parámetros conocidos en metalurgia física.

Una amplia gama de mecanismos es responsable de la evolución de las microestructuras. Esta evolución micro-estructural, que también altera las propiedades macroscópicas del material, se da a través de la evolución del tensor de rigidez del sistema y por la difusión potenciada por el esfuerzo hidrostático, los cuales son impulsados por la carga mecánica y térmica aplicada sobre el material. Fenómenos como transformaciones químicas no son incluidos en el proceso. La metalurgia física para un tratamiento termo-mecánico depende de los diversos mecanismos metalúrgicos que tienen lugar durante el procesamiento. La interrelación del proceso de recristalización, recuperación, crecimiento de grano, precipitación y transformación, conducen al desarrollo de la microestructura observadas en la parte final de cada tamaño, a través del tratamiento termo-mecánico. La recuperación, principal mecanismo de disipación de energía, es un proceso por el cual los granos una vez son deformados pueden reducir su energía almacenada mediante la eliminación de las fronteras

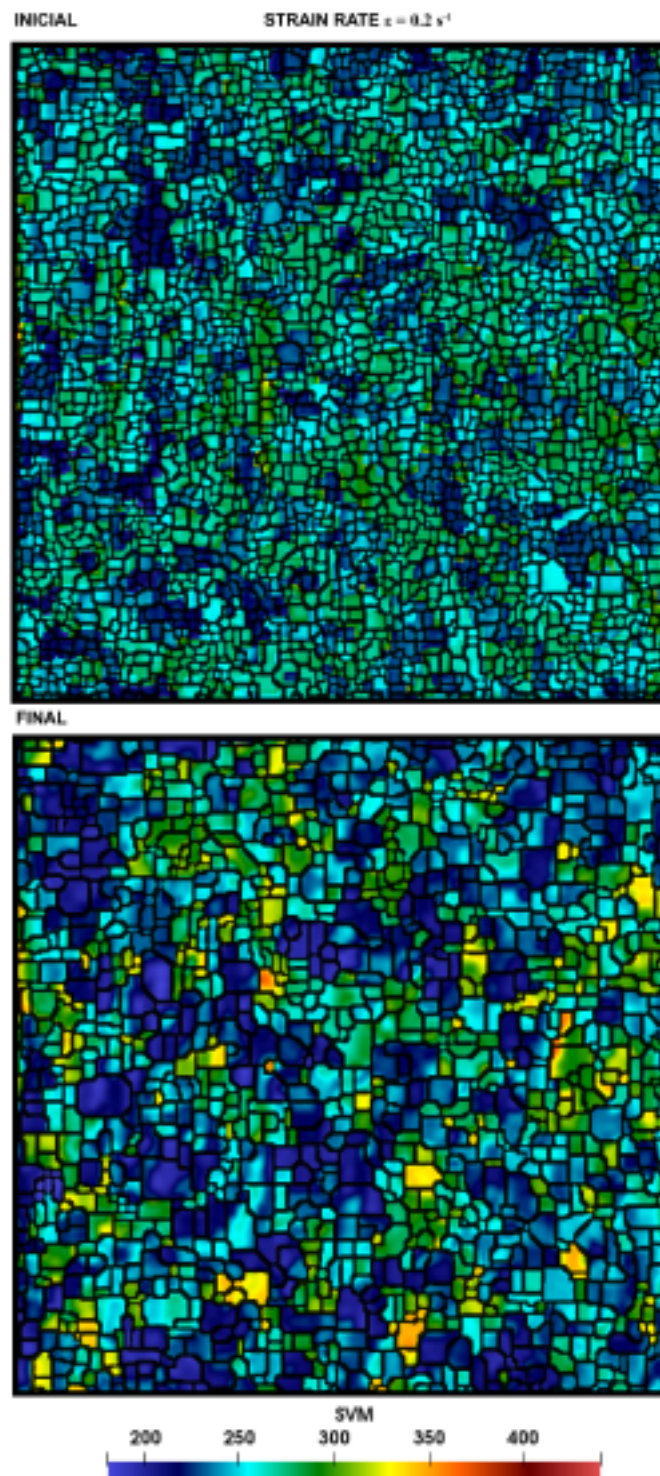


Figura 5-4. Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 10 micras.

entre sus cristales, potenciando el crecimiento final.

Estas deformaciones, principalmente debido a la probabilidad que las dislocaciones sean libres de moverse, se introducen y modifican por deformación y trabajan para aumentar la resistencia elástica del material, la distribución del esfuerzo Von Mises promedio se aprecian en la figura 5-5. Dado que la recuperación reduce la densidad de dislocación, el proceso suele ir acompañado de una reducción en la resistencia del material y un aumento inmediato de su ductilidad, siendo mayor en cuando mayor el tamaño del grano. El proceso de recristalización emerge y los granos deformados se reemplazan por un nuevo conjunto de granos no deformados que se nuclean (proceso no mostrado en este trabajo) y crecen hasta que los granos originales se han consumido por completo. La recristalización suele ir acompañada de una reducción de la resistencia y dureza del material y un aumento simultáneo de su ductilidad. El crecimiento del grano se produce a temperaturas cuando algunos de los granos finos recristalizados comienzan a crecer rápidamente. El crecimiento del grano es inhibido por diferentes procesos, haciendo que el sistema llegue a un mínimo local. Aspectos como partículas de segunda fase que fijan los límites del grano, son ejemplos de mecanismos que frenan este proceso. El control de estos procesos durante el tratamiento termo-mecánico puede generar altos niveles de resistencia y mantener una ductilidad aceptable.

Los modelos propuestos para predecir la evolución microestructural de los aceros al carbono, desde un punto de vista histórico, han contribuido sustancialmente a sugerir que la resistencia a la tracción tiene una relación lineal con la temperatura de transformación, independientemente de la composición química, para todo tipo de microestructuras. Este resultado indica que la resistencia a la tracción se puede calcular, si y sólo si, se puede predecir el comportamiento de transformación, aspecto que aún no se incluye en los modelos a esta escala. Adicionalmente, se ha contribuido en predecir la evolución microestructural durante el laminado en caliente de múltiples pasadas, incluyendo mecanismos de plasticidad. Lo que ha permitido contemplar las amplias aplicaciones potenciales de la metalurgia computacional, la distribución del esfuerzo Von Mises promedio se aprecian en la figura 5-6. Desafortunadamente, estos modelos han estado destinados a aplicarse a procesos de laminación en caliente, donde los tres procesos relevantes involucrados son el proceso de calentamiento, el proceso de laminación y el proceso de enfriamiento. Durante el primer proceso, los granos crecen; en el segundo, la microestructura se refina debido a la recristalización; y en el proceso de enfriamiento, se producen procesos de transformación. La predicción de la microestructura de otros aceros, como los aceros con alto contenido de carbono, los aceros especiales o los aceros microaleados, debe utilizar pruebas básicas para determinar cada uno de los parámetros. El mecanismo de evolución principal en este trabajo está articulado a los modelos de tipo Johnson-Mehl, basados en la teoría de la nucleación y el crecimiento, que se utilizan para modelar el progreso de una transformación.

Las figuras anteriores muestran el comportamiento del sistema una vez se hace un proceso de refinamiento del tamaño, donde los principales mecanismos de refuerzo para los aceros juegan un papel importante. Un material de grano fino es más duro y más fuerte que un material de

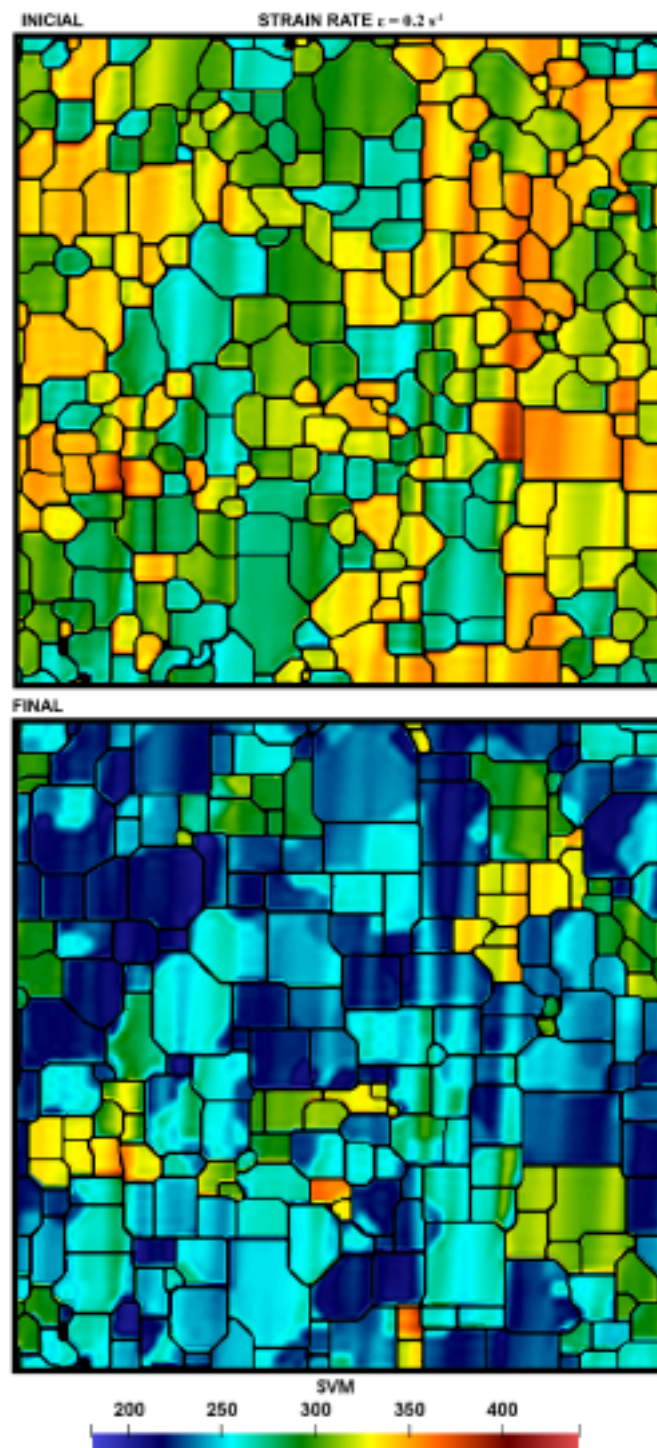


Figura 5-5.: Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 15 micras.

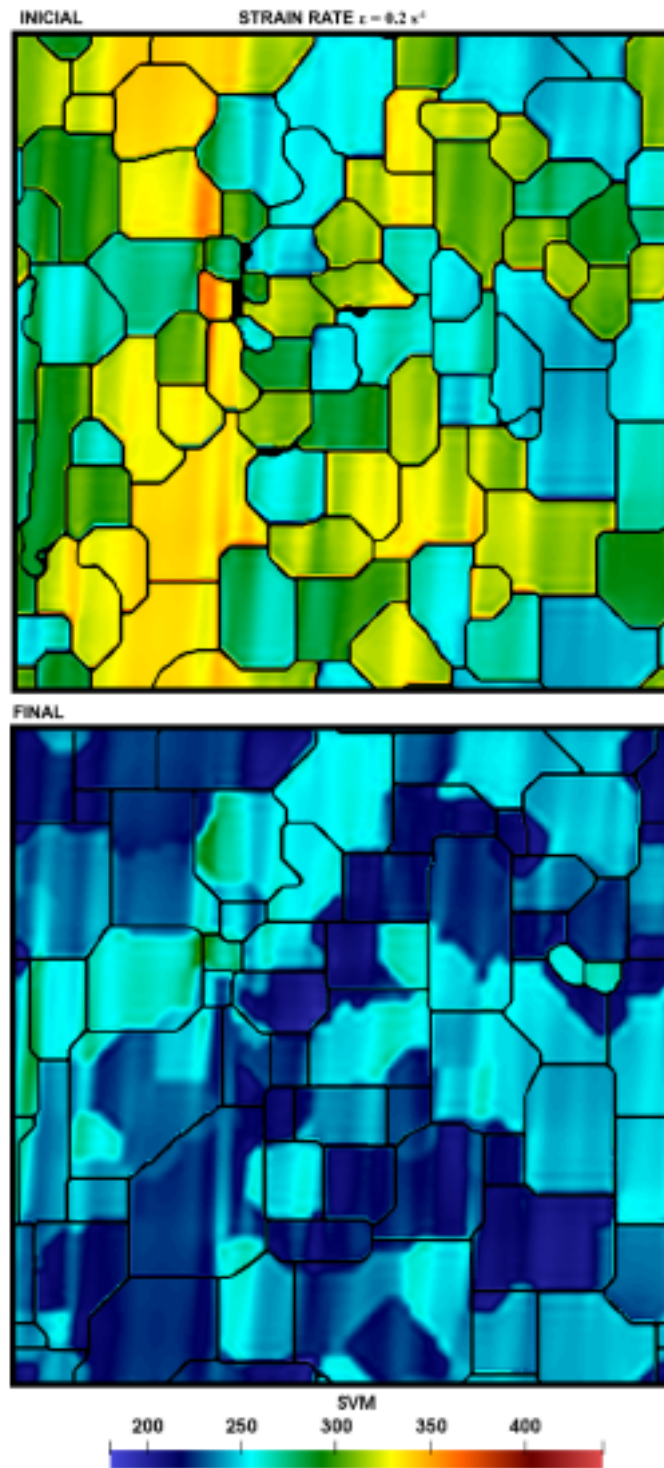


Figura 5-6.: Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 20 micras.

grano grueso, ya que el mayor número de límites de grano en el material de grano fino impide el movimiento de dislocación. La relación general entre el esfuerzo de cedencia y el tamaño de grano es descrita convencionalmente por la relación de Hall-Petch.

En este sentido, la resistencia y dureza de algunas aleaciones metálicas se puede mejorar por la presencia de partículas extremadamente pequeñas y uniformemente dispersas en la matriz de la fase original, similar al comportamiento observado en la Figura 5-7, donde cristales muy pequeños rodean cristales más grandes. El endurecimiento por precipitación, o el endurecimiento por envejecimiento, requiere una segunda fase que es soluble a alta temperatura, pero tiene una solubilidad limitada a temperaturas más bajas. El tamaño, la forma, la fracción de volumen y la distribución de las partículas son factores clave para mejorar el endurecimiento por precipitación. El endurecimiento por la deformación en las muestras es un importante proceso de fortalecimiento y es particularmente importante para obtener altos niveles de resistencia. De hecho, sin la adición de elementos de aleación especiales, los aceros al carbono pueden elevarse a niveles de resistencia por encima de 1500 MPa simplemente por el fenómeno del endurecimiento por deformación. Aumentar la densidad de dislocación aumenta la resistencia elástica, lo que a su vez da como resultado que se requiera una mayor tensión de corte para mover las dislocaciones.

El diseño previo al proceso de fabricación de productos con excelente calidad es el objetivo final del desarrollo tecnológico. Para lograr este objetivo, deben predecirse las propiedades de los productos manufacturados y tanto la química como el proceso de producción deben diseñarse cuidadosamente. Los avances recientes en metalurgia física, procesos de laminación y control por computadora han hecho grandes contribuciones al campo del control microestructural y a la predicción de propiedades, así como al desarrollo de modelos de control que permiten la predicción de la evolución microestructural y las propiedades mecánicas. Se espera que los beneficios máximos del control de fabricación se obtengan mediante el uso de predicciones derivadas de modelos físico-metalúrgicos. La conservación de recursos, la reducción de energía, la mejora del rendimiento, el reciclaje y la reducción del peso de las piezas son cada vez más importantes. En el futuro, se espera que el control de la microestructura ayude en el desarrollo de nuevas tecnologías de procesamiento que ofrezcan mejoras en las diferentes áreas de aplicación.

5.4. Conclusiones

En resumen, hemos propuesto un marco teóricamente informado para estudiar las propiedades mecánicas de los agregados poligonales. Este enfoque tiene en cuenta la interacción elástica de largo alcance entre los granos y los límites del grano y, al acoplar el tensor de rigidez en función de la orientación del grano, fue posible estudiar la evolución de la microestructura mediante una carga externa. El enfoque puede extenderse a cualquier estructura poligonal o condición de carga y no requiere ningún supuesto a priori de formas de grano o distribución de tamaño de grano. Una

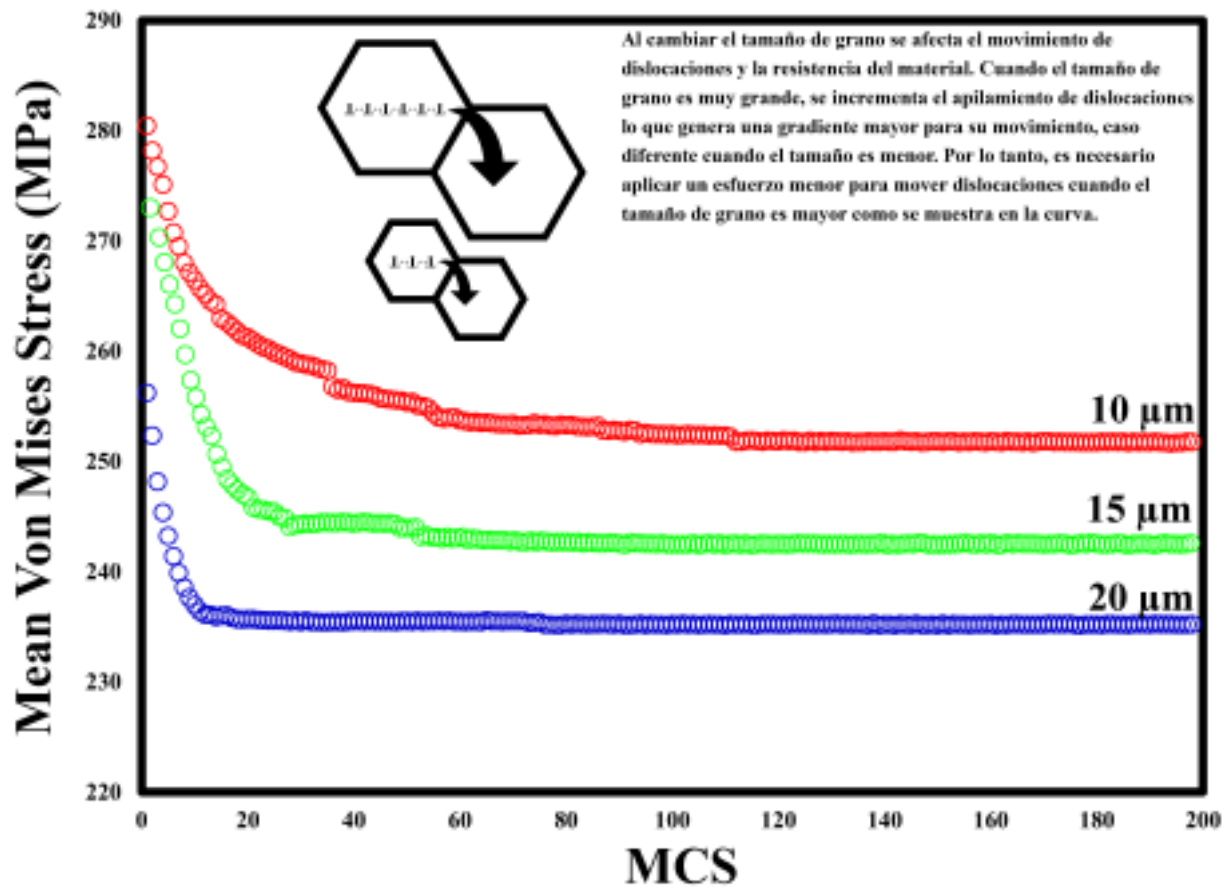


Figura 5-7.: Distribución del esfuerzo Von Mises promedio para una microestructura antes y después del proceso de deformación, para un radio medio de 20 micras.

característica importante de nuestro trabajo es el acoplamiento entre la orientación de grano y el tensor de deformación lineal ε el cual se define como una función del campo de desplazamientos \mathbf{u} .

Derivamos una serie de relaciones entre los componentes del tensor de esfuerzos, promediados en todas las fases o granos del material junto con las tensiones integradas de todas las fronteras. El promedio de volumen de la componente hidrostática de la tensión promedio es lineal en el área de los bordes de grano y la longitud de las líneas de unión de las intercaras. Aunque las tensiones de las intercaras y las fronteras son tensores, el valor medio del componente hidrostático (presión sobre el sistema) en el material depende sólo de las propiedades de la frontera. Generalmente, la tensión elástica promedio en un material no es hidrostática; aún así, los promedios del componente de tensión dependen sólo de cantidades estereológicas medibles, como los momentos de la función de distribución de misorientación entre dos granos y son, por lo demás, independientes de la geometría de la microestructura. Siempre que ninguna otra fuerza externa que no sea la presión hidrostática actúe sobre el material, los resultados se pueden aplicar a microestructuras arbitrarias; en particular, se aplican independientemente de cualquier tensión residual como la tensión en materiales depositados por asperción térmica o los esfuerzos de coherencia durante la precipitación de una segunda fase o los esfuerzos debidos a la expansión térmica diferencial. Su validez también es independiente de si los esfuerzos en las fases individuales se pueden relajar de forma independiente mediante el corte a lo largo de los planos de intercara. Los resultados describen los valores promedios, en todas los cristales presentes, de los componentes del tensor de esfuerzos. En contraste, esfuerzo promedio en cualquier cualquier cristal individual depende de una manera más complicada de la geometría, de su vecindario, del grado en que la tensión interna se acomoda con la deformación y de los componentes de los del esfuerzo en la frontera del grano.

Hemos aplicado el modelo para estudiar la respuesta mecánica de los materiales elásticos lineales y para problemas de elasticidad no lineales como la fluencia. Para el caso elástico lineal, se encontró que la tensión de Von Mises a lo largo del eje de carga disminuyó durante la prueba de tracción justo más allá del punto de cedencia macroscópico para el material, pero en algunas ubicaciones, la tensión fue mayor, lo que sugiere posibles puntos de falla. En contraste, durante el proceso de difusión, se muestra que los cambios complejos de la microestructura están controlados por la anisotropía de la orientación cristalográfica y la vecindad inmediata del grano, particularmente aquellas adyacentes a lo largo del eje de carga debido a la adaptación de la deformación con el proceso de transformación. Este comportamiento puede ser sensible a la elección de los parámetros del modelo de estructura poligonal (barreras de energía entre los granos) y, por lo tanto, la determinación de estos parámetros a partir de experimentos o simulaciones atomísticas permitirá una predicción precisa de las propiedades mecánicas.

Para un sistema no homogéneo con defectos arbitrarios espaciales (fronteras de grano), se propuso un método de iteración para calcular la energía elástica y a partir de ese punto estudiar su evolución durante deformación por difusión. La precisión y la eficiencia del método de iteración se verifican

numéricamente mediante la comparación de la solución analítica de los campos de esfuerzo/deformación en el continuo. Los resultados numéricos demuestran que una vez que se establece un valor de la constante elástica en función de la orientación del cristal, el sistema se vuelve elásticamente inhomogéneo, el método de iteración permite la evolución y reajuste local de las constantes elásticas, incluso para una falta de homogeneidad fuertemente puede proporcionar una buena solución. Esto sugiere que el método de iteración desarrollado es un enfoque eficiente para la simulación de la evolución de sistemas poligonales bajo diferentes condiciones de deformación y permite incluir características topológicas y geométricas del sistema.

Hemos propuesto un marco de modelo multiescala para estudiar la respuesta constitutiva de estructuras poligonales (sistemas policristalinos). Discutimos el papel de las restricciones de la compatibilidad elástica y la interacción anisotrópica de largo alcance que conduce al formalismo basado en la tensión sobre cada grano individual. Como ejemplo ilustrativo, hemos acoplado la energía libre elástica para una transición que describe las orientaciones de los cristales. Esta aproximación permite estudiar las propiedades mecánicas de policristales a partir de la comparación de sus tamaños medios de grano. Dado que las propiedades mecánicas del policristal son un promedio de las propiedades de los granos individuales, las curvas de tensión-deformación son más suaves en comparación con las de cristales individuales.

6. Resumen, conclusiones y recomendaciones

En esta tesis, se planteó el problema de desarrollar un esquema computacional basado en el modelo celular de Potts, modificado, para simular bajo condiciones controladas microestructuras con tamaños, formas y características definidas a priori. Luego de esto, se estudió su evolución cuando fueron sometidas a condiciones de deformación, esfuerzo y carga constantes, por lo que fue necesario desarrollar esquemas de muestreo inteligente y simulación multi-escala para resolver la ecuaciones de elasticidad y, de esta manera, evolucionar el sistema bajo condiciones de difusión en función del gradiente hidrostático. Para este propósito, se desarrollaron algunos conceptos y se evaluaron resultados de literatura en orden de jerarquizar y controlar la estructura de los sistemas a gran escala. El principal concepto fue de diseño y control de la microestructura. Este concepto fue desarrollado y usado en cada capítulo de esta tesis, demostrando que puede ser usado en múltiples aplicaciones, incluyendo fenómenos de deformación multiescala de sistemas complejos, estableciendo una aproximación única para el estudio del comportamiento mecánico de sistemas poligonales. Esta tesis inicia con una revisión de la literatura sobre sistemas poligonales estructurados y sobre las formas convencionales de afrontar las preguntas en ella inscritas (capítulo 2). Luego de la revisión del estado del arte, algunos aspectos relevantes salen a flote, aspectos como la posibilidad de obtener microestructuras con un tamaño definido a priori o como el hecho de que las simulaciones convencionales quedan atrapadas en mínimos locales de energía o la complejidad que se induce al mezclar el mundo mesoscópico y el mundo continuo para la solución de los campos de deformación y la complejidad de establecer efectivamente un simulador para microestructuras con características reales enmarcan los principales logros de este trabajo.

En este sentido, el capítulo 3 fue dedicado a obtener microestructuras con formas, tamaños y características controlados. Las principales contribuciones del capítulo 3 fueron:

- La construcción, desarrollo y parametrización de un funcional fenomenológico de energía libre, informado teóricamente.
- La implementación de una estrategia de solución para el proceso, vía minimización energética a través de simulación Monte Carlo.
- La obtención de microestructuras de materiales poligonales con características topológicas que se observan comúnmente en este tipo de agregados.

- La inclusión de penalizaciones energéticas mediante la adición de restricciones elásticas, lo que nos permitió gobernar y proporcionar una descripción completa de las estructuras poligonales, así como cuantificar y contrastar nuestros resultados con datos experimentales.
- Nos permitió controlar el tamaño medio y la distribución, habilitándonos como simulador para el diseño y control del sistema. Para lograr estos objetivos, empezamos por implementar una extensión 2D del modelo de Potts modificado, reproduciendo los resultados ya establecidos y entregando una visión para el estudio de sistemas estructurados poligonales.

Nuestros hallazgos nos permitieron predecir y tener control sobre la microestructura final, proporcionar una descripción concluyente sobre la forma correcta de capturar características microestructurales en sistemas poligonales, estableciendo una plataforma para estudiar sistemas más realistas y fenómenos de deformación en un régimen no elástico.

En los capítulos 4 y 5 se desarrollan estrategias jerárquicas, robustas, para el control de la forma, el tamaño y la distribución, así como la implementación de una metodología multiescala para estudiar la deformación del sistema. Las principales ideas incluyen la combinación de un esquema eficiente de muestreo que garantiza que el sistema no queda atrapado en mínimos locales, así como la inclusión de mecanismos físicos de evolución que logran que el sistema deje de crecer en función del cumplimiento de las restricciones elásticas impuestas sobre el sistema. Adicional a esto, se incluyen términos en el funcional de energía que nos permite representar el aporte energético en la estructura debida a la presencia de fronteras de grano, así como la energía elástica almacenada dentro del grano. Dándonos un punto de partida para el estudio de sistemas en régimen elástico. La principal ventaja de estas estrategias es la capacidad de representar cualquier microestructura poligonal junto con sus principales características topológicas, aunque por el método empleado aún no somos capaces de estudiar la cinética de crecimiento. Así como el desarrollo de un simulador para estudiar comportamiento mecánico en estos sistemas, disminuyendo los requerimientos computacionales convencionales para este tipo de simulaciones. De esta manera, estas aproximaciones al diseño y evolución de microestructuras poligonales, las principales contribuciones al estudio de estructuras poligonales pero esta vía son:

- La implementación de un esquema computacional para el modelamiento multiescala del proceso de deformación elástica no-lineal de las microestructuras poligonales.
- La re-estructuración del funcional, agregando términos adicionales a la energía elástica libre (aquella debida a los grados de libertad en la orientación del agregado poligonal), así como la energía elástica libre propia del grano (debida a la configuración propia del material) y la energía elástica libre debido a la existencia de las fronteras de grano, estas descripciones permiten describir transiciones estructurales de fase.
- Incluir la anisotropía de la orientación cristalográfica, la cual modifica la respuesta mecánica de los agregados poligonales, controlando tanto la respuesta completa del agregado como la

forma de las distribuciones locales de los campos de esfuerzo-deformación, cuyos valores extremos gobiernan los procesos de falla.

- La propuesta de un nuevo marco para modelar la respuesta no-lineal de un agregado poligonal debido a deformaciones externas mediante el acoplamiento de la evolución microestructural con la solución de los campos de esfuerzos.
- Un esquema para la solución de las ecuaciones de elasticidad vía funciones de base radial no simétrica para la solución en el continuo.

Nuestro enfoque codifica las propiedades elásticas del sistema y tiene en cuenta explícitamente la interacción de largo alcance inducida por la compatibilidad de los esfuerzos entre el conjunto de granos y el efecto de la distribución del tamaño de grano. Mediante el acoplamiento con el tensor de rigidez en función de la orientación del cristal y las interacciones elásticas, logramos simular la evolución de los granos por una carga externa vía mecanismo difusionales, en función del gradiente hidrostático. Lo que nos permitió aplicar el modelo para simular cargas de tracción uniaxial para tres microestructuras diferentes, con tamaños de grano medio de $20\mu\text{m}$, $30\mu\text{m}$ y $40\mu\text{m}$ usando teoría de elasticidad lineal.

A partir del capítulo 4 y 5 la potencial aplicación de las estrategias desarrolladas se contrasta con una aplicación importante en el área de la metalurgia física. La comparación con microestructuras obtenidas por tratamiento térmico para aceros inoxidable 304, con estructura austenítica, con alto grado de correlación entre lo experimental y lo simulado, ilustra la posibilidad de manipular los multiplicadores de Lagrange del modelo para obtener los parámetros de cualquier otro material poligonal. Para dilucidar la concordancia entre los resultados obtenidos a través del modelo computacional propuesto y el comportamiento de los agregados poligonales convencionales, utilizamos un acero inoxidable austenítico AISI 304 (barra redonda de 3/4 de pulgada - dureza 270 HV), que muestra una estructura policristalina. Diferentes muestras fueron tratadas térmicamente en un horno eléctrico al aire a 1000, 1050 y 1100°C respectivamente, durante 10 minutos y se enfriaron rápidamente en agua para lograr tres microestructuras diferentes. Cada muestra se preparó siguiendo un procedimiento de pulido estándar y el pulido fino con una suspensión de diamante de $1\mu\text{m}$ y una suspensión de alúmina de $0,03\mu\text{m}$ sobre un paño de microfibras. La microestructura se reveló utilizando ataque electroquímico utilizando una solución de 65 % HNO_3 , con una densidad de corriente entre $0.04\text{-}0.06\text{ A/cm}^2$ y un voltaje entre 1.5 y 2.0 V DC, con un cátodo de titanio de alta pureza; el tiempo de ataque varió entre 180 y 300 segundos dependiendo del tamaño del grano. Las micrografías se obtuvieron utilizando un microscopio óptico Nikon Eclipse LV100; se implementó un Sistema Automatizado de Imágenes Digitales (ADIS) para medir la distribución del tamaño de grano de cada muestra usando el software ImageJ v.1,50b. El reconocimiento de las estructuras poligonales en las secciones pulidas permitió la identificación de ~ 2500 granos por sección con un intervalo de confianza del 95 %, lo que garantizó la confiabilidad de los resultados con enfoque estadístico. Finalmente, se utilizaron variables como el área, perímetro, diámetro de Feret, forma y circularidad para evaluar la distribución del tamaño de grano.

A partir de los resultados de la tesis, surgen algunos problemas de investigación que son necesarios establecer rutas propias de solución, dentro los más relevantes están:

- En el crecimiento isotrópico bidimensional, el desarrollo de una estructura topológica única, en una red isotrópica, homogénea, puede alcanzar un estado de escala particular con estadísticas invariantes en el tiempo pero sin cambio de escala de longitud. Lo que abre la puerta para analizar el estado de escalamiento estable y único. Un vía de avance prometedora referente a la fracción del sistema congelada en su estado inicial. Experimentos con espuma de jabón modelos de campo medio han demostrado que el área de las regiones que no cambian durante el engrosamiento muestra un comportamiento que escala como una ley de potencia en el tiempo, aspectos a ser considerados y evaluados con el nuevo marco de simulación.
- Las teorías clásicas para el crecimiento de grano cuantifican y califican en acuerdo parcial las características fundamentales del proceso. El análisis de Burke & Turnbull muestra que los límites de grano se mueven para disminuir la energía interfacial del sistema; la velocidad de movimiento es proporcional a la curvatura del límite. El supuesto experimental de que el crecimiento de grano es auto-similar requiere que el análisis del área de grano promedio, evaluando si evoluciona linealmente con el tiempo si y solo si existe un único mecanismo de crecimiento. Las inclusiones de un conjunto de posibles mecanismos posibilitan la desviación del comportamiento del crecimiento en dos etapas, las cuales aumentan linealmente con el tiempo.
- Los análisis de Smith & von Neumann se centran en la relación entre el crecimiento del grano y sus características topológicas. Smith demostró que son las condiciones angulares en los vértices de grano las que dan lugar a la fuerza impulsora de la curvatura para el movimiento del límite. Además, que los requisitos topológicos para una matriz bidimensional requieren un crecimiento continuo de grano en cualquier policristal bidimensional desordenado, de este modo von Neumann mostró que la tasa de crecimiento de un grano de lado n es proporcional a seis menos n , independientemente del grano, de acuerdo con el enfoque de Euler lo que implica que nuestro modelo debe ser contrastado en 3D para cumplir con estos requisitos topológicos.
- Los intentos posteriores para cuantificar el crecimiento de grano a través de teorías de campo medio han demostrado ser infructuosos en reproducir distribuciones experimentales de tamaño de grano controladas. Las simulaciones continuas han impreso los resultados preliminares con elegancia y han brindado información sobre el proceso de crecimiento; sin embargo, tales modelos son difíciles de implementar y son menos flexibles que los modelos mesoscópicos, por lo que implica incrementar el tamaño del sistema de simulación para alcanzar los resultados de las simulaciones continuas.
- En contraste con el modelo clásico y discreto de Potts, el nuevo modelo desarrollado en este trabajo para el crecimiento de grano se aplica a microestructuras en diversos sistemas y es

aplicable en dimensiones mayores. La física del modelo es análoga a la física del crecimiento de grano real. Las microestructuras de simulación del modelo de Potts modificado y la dinámica de evolución concuerdan con la teoría y los experimentos clásicos del crecimiento de grano; desafortunadamente, los resultados aquí no apoyan las predicciones de la teoría de campo medio desarrollada por Hillert lo que abre un amplio campo de análisis para encontrar los argumentos teóricos de éstos resultados.

En el trabajo actual se ha desarrollado un modelo multisescala que integra el modelo constitutivo de Potts de mesoescala con simulación de macroescala para el estudio del efecto de las microestructuras heterogéneas en las propiedades del producto final. Sin embargo, el modelo de mesoescala todavía se basa en la teoría de bajo ángulo, que no modela explícitamente el comportamiento físico subyacente durante un proceso de deformación plástica. Para hacer que la simulación sea más realista, se puede introducir un marco multisescala que tenga en cuenta la dinámica de dislocación discreta de microescala. Si bien los trabajos iniciales se limitaron a dos dimensiones (2D), investigaciones recientes se centran en simulaciones 3D más realistas, aunque con mayor consumo de computo, con la capacidad de considerar características como la multiplicación, la intersección de dislocaciones, el deslizamiento cruzado, etc., que son cruciales para la formación de patrones de dislocación. Este enfoque es especialmente beneficioso para sistemas de superaleación, ya que el modelado directo de las estructuras de dislocación y los precipitados sondea el mecanismo subyacente del efecto de fortalecimiento de los precipitados de segunda fase. El trabajo futuro podría integrar enfoques en Dinámica molecular en la simulación para un modelado más realista del sistema físico. Se debe estudiar el comportamiento de las dislocaciones masivas en las superaleaciones endurecidas por precipitación.

A. Anexo: rol de las restricciones geométricas

En orden de clarificar la aplicación significativa de los términos específicos introducidos en el Hamiltoniano desarrollado en este trabajo, ilustramos cómo los módulos elásticos aseguran el control relativo sobre granos individuales, permitiendo mantener sus atributos cercanos a los valores de restricción. Para la minimización de \mathcal{H} , se hace uso de penalidades energéticas que permiten describir las interacciones que nacen de la mecánica clásica. En el contexto de Monte Carlo, podemos describir estas penalidades energéticas de una manera elástica general. Estas restricciones son cero si el valor es igual al valor objetivo e incrementa a medida que el valor diverge del valor objetivo, penalizando el funcional. Debido a que estas penalidades disminuyen suavemente hacia un mínimo cuando la restricción se satisface, el criterio de Metropolis automáticamente conduce cualquier configuración del sistema hacia la condición que satisface esta penalidad. Para la manipulación geométrica y topológica de estructuras con formas, tamaños y distribuciones deseadas, es necesario la correcta parametrización de las penalidades que permitan forzar al sistema a adoptar una configuración deseada. El proceso de *tunning* de las restricciones elásticas implica hacer un análisis de sensibilidad para la configuración de un único grano circular, considerando que el incrementando no controlado de λ/T y γ/T reduce la velocidad de aceptación, lo cual disminuye la velocidad de la simulación y hace el sistema ineficiente computacionalmente. Si la relación de λ/T y γ/T son muy grandes, el sistema se congela y sólo configuraciones muy limitadas ocurrirán (imágenes siguientes). Como el objetivo fundamental del proyecto es generar estructuras policristalinas con cualquier forma deseada, se simulan varios sistemas en los que se disminuye y aumentan las penalidades energéticas en función del tamaño medio de grano, forma y distribución.

Las figuras a continuación presentan una secuencia de imágenes para el crecimiento individual de uno de los granos. El objetivo de esta parte es obtener un archivo de posiciones con valores reales, dispuestos bajo una estructura cúbica orientada en una dirección de anisotropía aleatoria para cada grano. Para mejorar la velocidad de cómputo, el proceso de construcción es realizado con posiciones enteras, antes de ser trasladadas a números reales. El número de celdas por cada grano fue limitado de acuerdo con el tamaño de la muestra. El valor de celdas debe ser mucho más grande que el tamaño promedio de grano esperado debido a que solamente una porción de cada uno será seleccionada al final para pertenecer a la muestra. El procedimiento es realizado grano por grano, donde cada estructura esta representada por un cubo centrado en el origen, donde los

límites fueron $-L$ y L para cada índice, ofreciendo un buen espacio para el libre crecimiento. Cada nueva celda ocupará una posición en la matriz hasta alcanzar un número particular de estructuras localizadas.

El método de crecimiento fue optimizado de tal manera que la inicialización comienza con la colocación de clusters semilla. El procedimiento para la localización de cada estructura considera información que contiene las posiciones ya ocupadas y las posibles posiciones vecinas a las posiciones registradas. Para definir vecinos es necesario un ciclo por todos los núcleos de cada grano, donde es necesario evaluar el estado de ocupación de sus 8 primeros vecinos. Una nueva posición es adicionada cuando se satisface las condiciones de misorientación de cualquiera de sus vecinos. También, un contador de vecinos de superficie se incrementa cada que una posición es añadida. Es importante tener en cuenta que algunas posiciones podrían aparecer más de una vez debido a que corresponden a un posible vecino de más de una estructura. Como la elección de la nueva posición a ser ocupada es seleccionada aleatoriamente, estas posiciones repetidas tienen una mayor probabilidad de ser seleccionadas. Esta consideración es muy importante para el crecimiento homogéneo del grano. Si esta no es tenida en cuenta, la muestra terminaría siendo una cadena de estructuras ramificadas y no un grano. Cuando el grano encuentra el límite de estructuras localizadas, las posiciones enteras son trasladadas a valores reales. Para este propósito, primero son generados aleatoriamente tres vectores unitarios perpendiculares entre sí. Estos vectores definen la dirección de la de anisotropía y los vectores de traslación para una red cúbica simple. Primero se genera aleatoriamente un vector unitario; posteriormente se genera un nuevo vector unitario y finalmente un producto cruz define el tercer vector. La estructura semilla es relocalizada en un punto aleatorio dentro las dimensiones de la muestra y todas las demás posiciones son reubicadas a partir de este punto y el vector traslación es obtenido. Por último, las posiciones en números reales y las direcciones de anisotropía de cada grano son almacenadas en un archivo para su utilización en la segunda etapa.

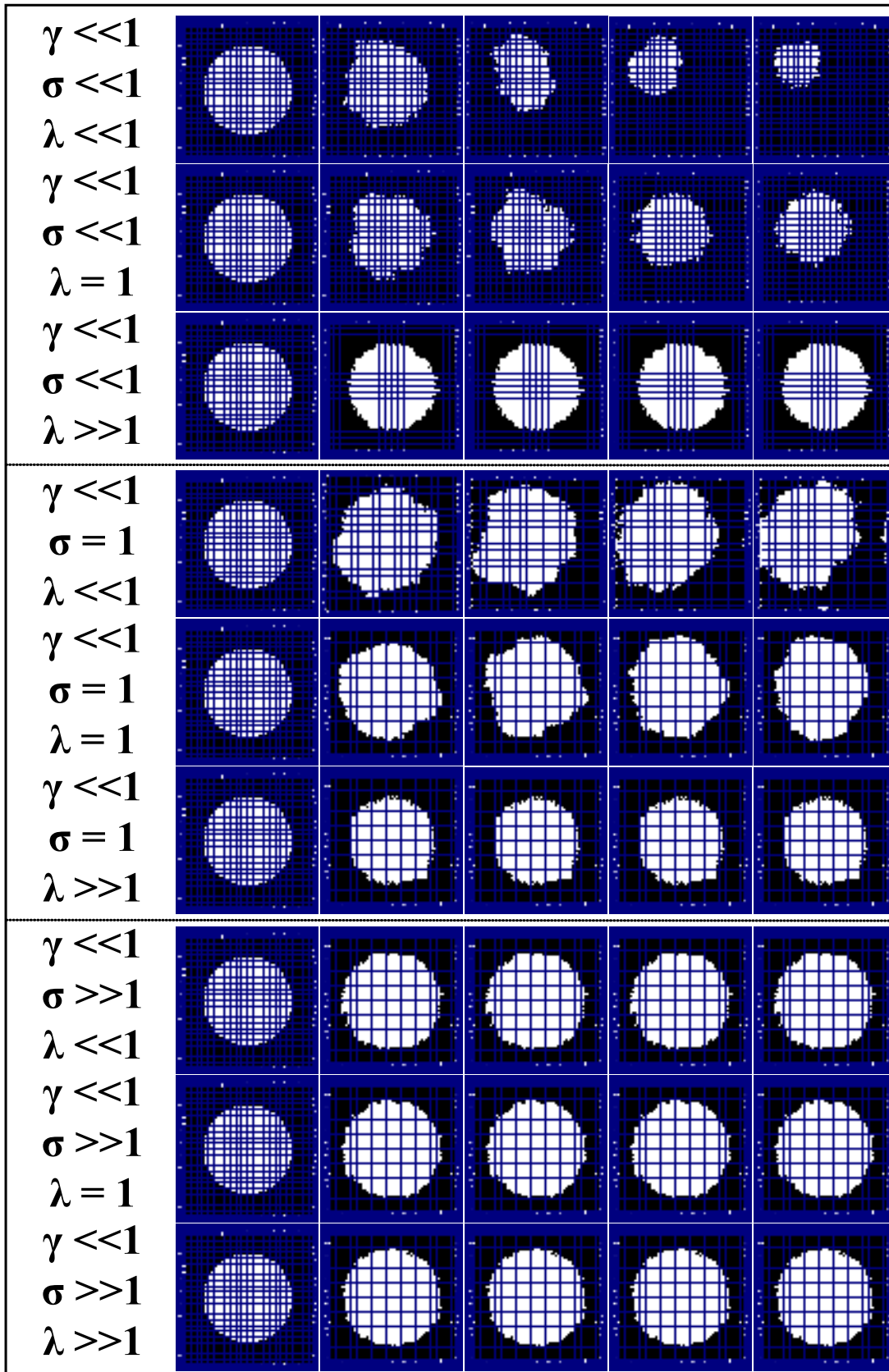
El crecimiento es realizado por medio de la selección aleatoria de los granos y la selección de las posibles nuevas estructuras. Para ser ubicado, cada nueva estructura debería satisfacer tres condiciones: (i). La nueva posición debe estar ubicada entre los límites de la muestra. (ii) La estructura seleccionada debería tener al menos una estructura vecina del mismo grano ya localizado, condición que se evalúa en la matriz y (iii) se debe establecer una distancia mínima entre átomos de diferentes granos.

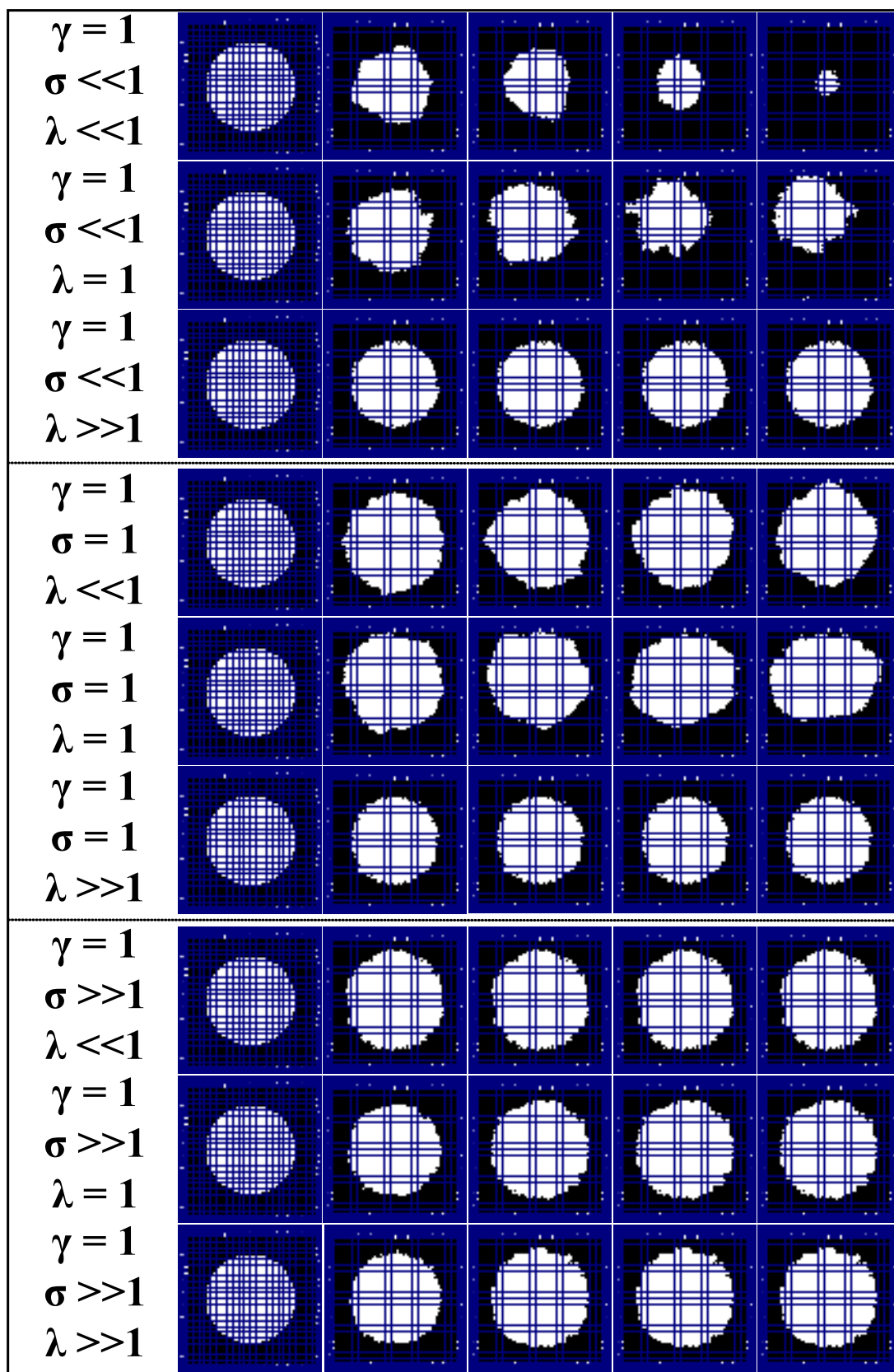
Es necesario establecer este número por debajo de 1 μcm para asegurar que se cumpla la condición de densidad. Valores de alrededor de 0.9 fueron asumidos en las simulaciones aquí presentadas.

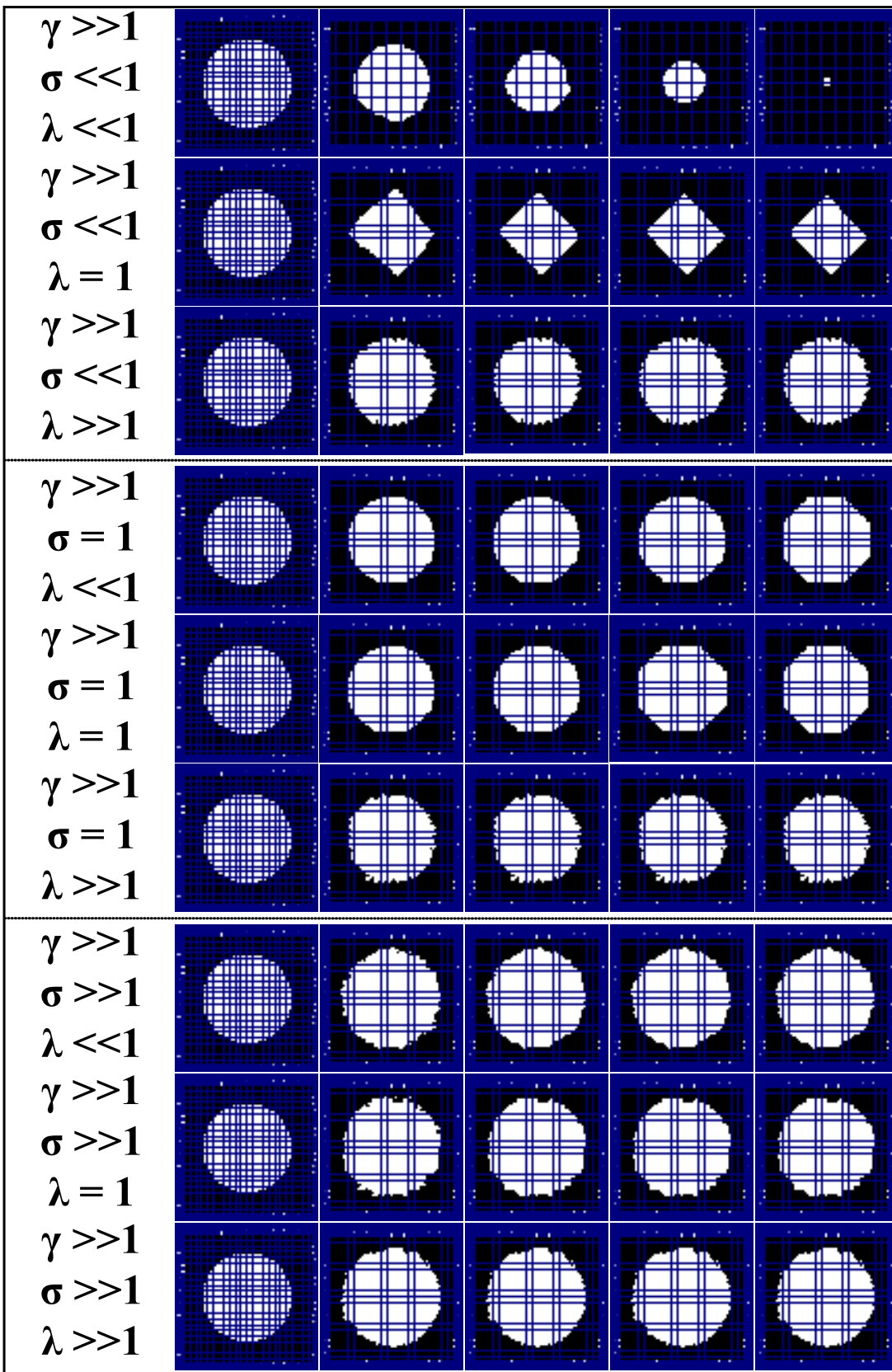
En particular, en el procedimiento empleado aquí, nos aseguramos de ubicar primero todos los átomos que satisficieran la condición de distancia inter-granular mayor o igual a 1 μcm antes de ubicar aquellos de distancias menores.

El propósito fue evitar al máximo espacios intergranulares.

Finalmente, se registran en un archivo de salida la posición de cada átomo, un identificador del número de grano y una bandera que indique la pertenencia o no a las fronteras de grano.







Referencias

- [1] D. Xu, C. Ji, H. Zhao, D. Ju, and M. Zhu, “A new study on the growth behavior of austenite grains during heating processes,” *Scientific Reports*, vol. 7, no. 1, 2017.
- [2] K. Kawasak, T. Naga, and K. Nakashima, “Vertex models for two dimensional grain growth,” *Philosophical Magazine B*, vol. 60, no. 3, pp. 399–421, 1989.
- [3] C. Thompson, “Grain growth and evolution of other cellular structures,” *Solid State Physics - Advances in Research and Applications*, vol. 55, no. C, pp. 269–314, 2001.
- [4] H. Frost and C. Thompson, “Computer simulation of grain growth,” *Current Options in Solid State and Materials Science*, vol. 1, p. 361, 1996.
- [5] M. Anderson, G. Grest, and D. Srolovitz, “Computer simulation of normal grain growth in three dimensions,” *Philosophical Magazine B*, vol. 59, no. 3, pp. 293–329, 1989.
- [6] J. Schafer and K. Albe, “Competing deformation mechanisms in nanocrystalline metals and alloys: Coupled motion versus grain boundary sliding,” *Acta Materialia*, vol. 60, no. 17, pp. 6076–6085, 2012.
- [7] S. Allen and E. Thomas, *The Structure of Materials*. Massachusetts: John Wiley and Sons, Inc, first edition ed., 1999.
- [8] G. Rohrer, *Structure and Bonding in Crystalline Materials*. Cambridge: Cambridge University Press, first edition ed., 2001.
- [9] D. Henkel and A. Pense, *Structure and Properties of Engineering Materials*. Boston: The McGraw-Hill Companies, fifth edition ed., 2002.
- [10] M. Dove, *Structure and dynamics: an atomic view of materials*. Cambridge: Oxford University Press, first edition ed., 2003.
- [11] M. Meyers and K. Chawla, *Mechanical behavior of materials*. Cambridge: Cambridge University Press, second edition ed., 2008.
- [12] M. Avrami, “Kinetics of phase change. i: General theory,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 7, no. 12, pp. 1103–1112, 1939.

- [13] M. Avrami, "Kinetics of phase change. ii transformation-time relations for random distribution of nuclei," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 8, no. 2, pp. 212–224, 1940.
- [14] M. Avrami, "Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 9, no. 2, pp. 177–184, 1941.
- [15] D. Zollner and P. Streitenberger, *Normal grain growth: Monte Carlo Potts model simulation and mean-field theory*. Springer, 2008.
- [16] T. Sano and G. Rohrer, "Experimental evidence for the development of bimodal grain size distributions by the nucleation-limited coarsening mechanism," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 90, no. 1, pp. 211–216, 2007.
- [17] C. Smith, *Grain shapes and other metallurgical applications of topology*. Cleveland: American Society for Metals, first edition ed., 1952.
- [18] G. Gottstein and S. Lasar, *Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications*. Germany: CRC Press, Taylor and Francis Group, second edition ed., 2010.
- [19] F. Humphreys and M. Hatherly, *Chapter 10 - The Growth and Stability of Cellular Microstructures*. Oxford: Elsevier, second edition ed., 2004.
- [20] E. Holm, M. Miodownik, and A. Rollett, "On abnormal subgrain growth and the origin of recrystallization nuclei," *Acta Materialia*, vol. 51, no. 9, pp. 2701–2716, 2003.
- [21] J. Rudnizki, B. Zeislmaier, U. Prahl, and W. Bleck, "Prediction of abnormal grain growth during high temperature treatment," *Computational Materials Science*, vol. 49, no. 2, pp. 209–216, 2010.
- [22] A. Williamson and J. Delplanque, "Investigation of dynamic abnormal grain growth using the monte carlo potts method," *Computational Materials Science*, vol. 124, pp. 114–129, 2016.
- [23] R. Ding, D. Moldovan, V. Yamakov, D. Wolf, and S. Phillpot, "Effects of microstructural inhomogeneity on dynamic grain growth during large-strain grain boundary diffusion-assisted plastic deformation," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 13, no. 7, p. 1129, 2005.
- [24] D. Moldovan, D. Wolf, S. Phillpot, A. Mukherjee, and H. Gleiter, "Grain-boundary diffusion-controlled stress concentration in polycrystals," *Philosophical Magazine Letters*, vol. 83, no. 1, pp. 29–38, 2003.
- [25] T. Yu and H. Shi, "Effects of grain size distribution on the creep damage evolution of polycrystalline materials," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43, no. 16, 2010.
- [26] D. Zollner and P. Streitenberger, "Three-dimensional normal grain growth: Monte carlo

- potts model simulation and analytical mean field theory,” *Scripta Materialia*, vol. 54, no. 9, pp. 1697–1702, 2006.
- [27] D. Zollner and P. Streitenberger, “Computer simulations and statistical theory of normal grain growth in two and three dimensions,” *Materials Science Forum*, vol. 467-470, no. II, pp. 1129–1134, 2004.
- [28] D. Zollner and P. Streitenberger, “Monte carlo simulation of normal grain growth in three dimensions,” *Materials Science Forum*, vol. 567-568, pp. 81–84, 2008.
- [29] D. Zollner and P. Streitenberger, “Growth history of individual grains in polycrystals: Theoretical model and simulation studies,” *Materials Science Forum*, vol. 715-716, pp. 877–882, 2012.
- [30] E. Holm and C. Battaile, “The computer simulation of microstructural evolution,” *JOM*, vol. 53, no. 9, pp. 20–23, 2001.
- [31] R. Coble, “A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials,” *Journal of Applied Physics*, vol. 34, no. 6, pp. 1679–1682, 1963.
- [32] M. Ashby, R. Raj, and R. Gifkins, “Diffusion-controlled sliding at a serrated grain boundary,” *Scripta Metallurgica*, vol. 4, no. 9, pp. 737–741, 1970.
- [33] M. Ashby, “Boundary defects, and atomistic aspects of boundary sliding and diffusional creep,” *Surface Science*, vol. 31, pp. 498 – 542, 1972.
- [34] R. Raj and M. Ashby, “On grain boundary sliding and diffusional creep,” *Metallurgical Transactions*, vol. 2, pp. 1113 – 1127, 1971.
- [35] B. Kim, K. Hiraga, K. Morita, and I. Chen, “Rate of creep due to grain-boundary diffusion in polycrystalline solids with grain-size distribution,” *Philosophical Magazine*, vol. 85, no. 20, pp. 2281–2292, 2005.
- [36] H. Ch’ng and J. Pan, “Cubic spline elements for modelling microstructural evolution of materials controlled by solid-state diffusion and grain-boundary migration,” *Journal of Computational Physics*, vol. 196, no. 2, pp. 724–750, 2004.
- [37] B. Kim, K. Hiraga, K. Morita, and H. Yoshida, “Analysis of grain-boundary sliding with rotating hexagonal particles,” *Key Engineering Materials*, vol. 433, pp. 305–310, 2010.
- [38] J. Pan, A. Cocks, and S. Kucherenko, “Finite element formulation of coupled grain-boundary and surface diffusion with grain-boundary migration,” *Proceedings of the Royal Society A*, vol. 453, no. 1965, pp. 2161–2184, 1997.
- [39] A. Cocks and A. Searle, “Void growth by grain-boundary diffusion in fine grained materials,” *Mechanics of Materials*, vol. 12, no. 3-4, pp. 279–287, 1991.

- [40] A. Cocks and J. Pan, “Void growth ahead of a dominant crack in a material which deforms by coble creep,” *International Journal of Fracture*, vol. 60, no. 3, pp. 249–265, 1993.
- [41] J. Harper and J. Dorn, “Viscous creep of aluminum near its melting temperature,” *Acta Metallurgica*, vol. 5, no. 11, pp. 654 – 665, 1957.
- [42] M. Ashby and D. Jones, *Chapter 22 - Mechanisms of Creep, and Creep-Resistant Materials*. Boston: Butterworth-Heinemann, fourth edition ed., 2012.
- [43] S. Onaka, A. Madgwick, and T. Mori, “Kinetics of diffusional creep discussed by energy dissipation and effect of grain-size distribution on the rate equations,” *Acta Materialia*, vol. 49, no. 12, pp. 2161–2168, 2001.
- [44] J. Hazzledine, P.M. Schneibel, “Theory of coble creep for irregular grain structures,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 41, no. 4, pp. 1253–1262, 1993.
- [45] J. Schneibel, R. Coble, and R. Cannon, “The role of grain size distributions in diffusional creep,” *Acta Metallurgica*, vol. 29, no. 7, pp. 1285 – 1290, 1981.
- [46] J. Ford, J. Wheeler, and A. Movchan, “Computer simulation of grain-boundary diffusion creep,” *Acta Materialia*, vol. 50, no. 15, pp. 3941 – 3955, 2002.
- [47] H. Ch’ng and J. Pan, “Modelling microstructural evolution of porous polycrystalline materials and a numerical study of anisotropic sintering,” *Journal of Computational Physics*, vol. 204, no. 2, pp. 430–461, 2005.
- [48] B. Block, P. Virnau, and T. Preis, “Multi-gpu accelerated multi-spin monte carlo simulations of the 2d ising model,” *Computer Physics Communications*, vol. 181, no. 9, pp. 1549–1556, 2010.
- [49] J. Iglesias, O. Nagel, S. Gonzalves, and M. Kiwi, “Monte carlo simulation of a two-dimensional magnetic foam,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 226-230, no. PART I, pp. 548–549, 2001.
- [50] A. Oates, N. Gorfinkiel, M. González-Gaitán, and C. Heisenberg, “Quantitative approaches in developmental biology,” *Nature Reviews Genetics*, vol. 10, no. 8, pp. 517–530, 2009.
- [51] R. Cowan, “Network models of innovation and knowledge diffusion,” *Research Memorandum*, no. 016, pp. 1–28, 2004.
- [52] T. Schelling, “Dynamic models of segregation,” *The Journal of Mathematical Sociology*, vol. 1, no. 2, pp. 143–186, 1971.
- [53] A. Feller and E. Livine, “Ising spin network states for loop quantum gravity: A toy model for phase transitions,” *Classical and Quantum Gravity*, vol. 33, no. 6, 2016.

- [54] J. Burke and D. Turnbull, "Recrystallization and grain growth," *Progress in Metal Physics*, vol. 3, pp. 220–292, 1952.
- [55] N. Rivier, "Structure of random cellular networks and their evolution," *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 23, no. 1-3, pp. 129–137, 1986.
- [56] F. Lewis, "The geometry of growth and cell division in columnar parenchyma," *American Journal of Botany*, vol. 31, no. 10, pp. 619–629, 1944.
- [57] N. Rivier and A. Lissowski, "On the correlation between sizes and shapes of cells in epithelial mosaics," *Journal of Physics A*, vol. 15, no. 3, pp. L143–L148, 1982.
- [58] D. Aboav, "The arrangement of grains in a polycrystal," *Metallography*, vol. 3, no. 4, pp. 383–390, 1970.
- [59] D. Weaire, "Some remarks on the arrangement of grains in a polycrystal," *Metallography*, vol. 7, no. 2, pp. 157–160, 1974.
- [60] J. Morral and M. Ashby, "Dislocated cellular structures," *Acta Metallurgica*, vol. 22, no. 5, pp. 567–575, 1974.
- [61] M. Blanc and A. Mocellin, "Grain coordination in plane sections of polycrystals," *Acta Metallurgica*, vol. 27, no. 7, pp. 1231–1237, 1979.
- [62] E. Carnal and A. Mocellin, "A topological model for plane sections of polycrystals," *Acta Metallurgica*, vol. 29, no. 1, pp. 135–143, 1981.
- [63] J. von Neumann, "Grain shapes and other metallurgical applications of topology," *Metal Interfaces*, p. 108, 1952.
- [64] W. Mullins, "Two dimensional motion of idealized grain boundaries," *Journal of Applied Physics*, vol. 27, no. 7, pp. 135–143, 1956.
- [65] J. Glazier, S. Gross, and J. Stavans, "Dynamics of two-dimensional soap froths," *Physical Review A*, vol. 36, no. 1, pp. 306–312, 1987.
- [66] P. Streitenberger and D. Zollner, "Effective growth law from three-dimensional grain growth simulations and new analytical grain size distribution," *Scripta Materialia*, vol. 55, no. 5, pp. 461–464, 2006.
- [67] D. Zollner, *Monte Carlo Potts Model Simulation and Statistical Mean-Field Theory of Normal Grain Growth*. Aachen: Shaker, Aachen, first edition ed., 2004.
- [68] M. Hillert, "On the theory of normal and abnormal grain growth," *Acta Metallurgica*, vol. 13, no. 3, pp. 227–238, 1965.
- [69] G. Abbruzzese, I. Heckelmann, and K. Lucke, "Statistical theory of two-dimensional grain

- growth-i. the topological foundation,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 40, no. 3, pp. 519–532, 1992.
- [70] I. Lifshitz and V. Slyozov, “The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 19, no. 1-2, pp. 35–50, 1961.
- [71] N. Louat, “On the theory of normal grain growth,” *Acta Metallurgica*, vol. 22, no. 6, pp. 721–724, 1974.
- [72] H. Frost, C. Thompson, and D. Walton, “Simulation of thin film grain structures ii. abnormal grain growth,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 40, no. 4, pp. 779–793, 1992.
- [73] O. Hunderi and N. Ryum, “The kinetics of normal grain growth,” *Journal of Materials Science*, vol. 15, no. 5, pp. 1104–1108, 1980.
- [74] C. Pande and E. Dantsker, “On a stochastic theory of grain growth-iv,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 42, no. 8, pp. 2899–2903, 1994.
- [75] V. Fradkov, M. Glicksman, M. Palmer, and K. Rajan, “Topological events in two dimensional grain growth: Experiments and simulations,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 42, no. 8, pp. 2719–2727, 1994.
- [76] O. Ivasishin, S. Shevchenko, N. Vasiliev, and S. Semiatin, “3d monte carlo simulation of texture-controlled grain growth,” *Acta Materialia*, vol. 51, no. 4, pp. 1019–1034, 2003.
- [77] Q. Yu and S. Esche, “A monte carlo algorithm for single phase normal grain growth with improved accuracy and efficiency,” *Computational Materials Science*, vol. 27, no. 3, pp. 259–270, 2003.
- [78] E. Holm, G. Hassold, and M. Miodownik, “On misorientation distribution evolution during anisotropic grain growth,” *Acta Materialia*, vol. 49, no. 15, pp. 2981–2991, 2001.
- [79] A. Rollett, G. Gottstein, L. Shvindlerman, and D. Molodov, “Grain boundary mobility - a brief review,” *Zeitschrift fuer Metallkunde/Materials Research and Advanced Techniques*, vol. 95, no. 4, pp. 226–229, 2004.
- [80] R. Lesar, *Introduction to Computational Materials Science, Fundamentals to Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, first edition ed., 2013.
- [81] I. Yegorov, C. Torres, and M. Emelianenko, “A boltzmann-type kinetic model for misorientation distribution functions in two-dimensional fiber-texture polycrystalline grain growth,” *Acta Materialia*, vol. 109, pp. 230–247, 2016.
- [82] E. Lazar, J. Mason, R. Macpherson, and D. Srolovitz, “A more accurate three-dimensional grain growth algorithm,” *Acta Materialia*, vol. 71, p. 390, 2014.

- [83] D. Weaire and J. Kermode, "Computer simulation of a two-dimensional soap froth i. method and motivation," *Philosophical Magazine B*, vol. 48, no. 3, pp. 245–259, 1983.
- [84] D. Weaire and J. Kermode, "Computer simulation of a two-dimensional soap froth ii. analysis of results," *Philosophical Magazine B*, vol. 50, no. 3, pp. 379–395, 1984.
- [85] J. Jeppsson, J. Agren, and M. Hillert, "Modified mean field models of normal grain growth," *Acta Materialia*, vol. 56, no. 18, pp. 5188–5201, 2008.
- [86] F. Ng, "Statistical mechanics of normal grain growth in one dimension: A partial integro-differential equation model," *Acta Materialia*, vol. 120, pp. 453–462, 2016.
- [87] L. Maire, B. Scholtes, C. Moussa, N. Bozzolo, D. Pino-Muñoz, and M. Bernacki, "Improvement of 3d mean field models for capillarity driven grain growth based on full field simulations," *Journal of Materials Science*, vol. 51, no. 24, pp. 10970–10981, 2016.
- [88] D. Moldovan, D. Wolf, S. Phillpot, and A. Haslam, "Role of grain rotation during grain growth in a columnar microstructure by mesoscale simulation," *Acta Materialia*, vol. 50, no. 13, pp. 3397–3414, 2002.
- [89] D. Moldovan, V. Yamakov, D. Wolf, and S. Phillpot, "Scaling behavior of grain-rotation-induced grain growth," *Physical Review Letters*, vol. 89, no. 20, pp. 2061011–2061014, 2002.
- [90] J. Stavans, "The evolution of cellular structures," *Reports on Progress in Physics*, vol. 56, pp. 733–789, 1993.
- [91] J. Glazier and D. Weaire, "The kinetics of cellular patterns," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 4, no. 8, pp. 1867–1894, 1992.
- [92] M. Miodownik, E. Holm, and G. Hassold, "Highly parallel computer simulations of particle pinning: zener vindicated," *Scripta Materialia*, vol. 42, no. 12, pp. 1173–1177, 2000.
- [93] S. Guessasma, E. Suzon, T. Grosdidier, and F. Wagner, "Static recrystallisation in an ods FeAl alloy: The effect of particles on texture and anisotropic grain growth developments," *Intermetallics*, vol. 16, no. 8, pp. 1013–1025, 2008.
- [94] P. Rios and G. Fonseca, "Grain boundary pinning by particles," *Materials Science Forum*, vol. 638-642, pp. 3907–3912, 2010.
- [95] N. Rivier, "On the structure of random tissues or froths, and their evolution," *Philosophical Magazine B*, vol. 47, p. 45, 1983.
- [96] J. Glazier and F. Graner, "Simulation of the differential adhesion driven rearrangement of biological cells," *Physical Review E*, vol. 47, no. 3, pp. 2128–2154, 1993.

- [97] D. Weaire and J. Glazier, "Relation between volume, number of faces and three-dimensional growth laws in coarsening cellular patterns," *Philosophical Magazine Letters*, vol. 68, no. 6, pp. 363–365, 1993.
- [98] D. Zollner, "Treating grain growth in thin films in three dimensions: A simulation study," *Computational Materials Science*, vol. 125, pp. 51–60, 2016.
- [99] D. Zollner, "Grain microstructural evolution in 2d and 3d polycrystals under triple junction energy and mobility control," *Computational Materials Science*, vol. 118, pp. 325–337, 2016.
- [100] P. Streitenberger and D. Zollner, "Topology based growth law and new analytical grain size distribution function of 3d grain growth," *Materials Science Forum*, vol. 558-559, no. PART 2, pp. 1183–1188, 2007.
- [101] D. Zollner and P. Streitenberger, "Monte carlo potts model simulation and statistical theory of 3d grain growth," *Materials Science Forum*, vol. 558-559, no. PART 2, 2007.
- [102] H. Wang, G.-q. Liu, and X.-g. Qin, "Grain size distribution and topology in 3d grain growth simulation with large-scale monte carlo method," *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials*, vol. 16, no. 1, pp. 37–42, 2009.
- [103] A. Garcia, V. Tikare, and E. Holm, "Three-dimensional simulation of grain growth in a thermal gradient with non-uniform grain boundary mobility," *Scripta Materialia*, vol. 59, no. 6, pp. 661–664, 2008.
- [104] E. Fjeldberg and K. Marthinsen, "A 3d monte carlo study of the effect of grain boundary anisotropy and particles on the size distribution of grains after recrystallisation and grain growth," *Computational Materials Science*, vol. 48, no. 2, pp. 267–281, 2010.
- [105] K. Phaneesh, A. Bhat, G. Mukherjee, and K. Kashyap, "3d mc simulation of grain growth kinetics and the zener limit in polycrystals," *Applied Mechanics and Materials*, vol. 598, pp. 8–12, 2014.
- [106] O. Ivasishin, S. Shevchenko, S. Semiatin, and O. Shljachta, "Implementation of exact grain-boundary geometry into a 3d monte-carlo (potts) model for microstructure evolution," *Ukrainian Journal of Physics*, vol. 54, no. 5, pp. 480–490, 2009.
- [107] C. Roberts, S. Semiatin, and A. Rollett, "Two-phase microstructure generation in 3d based on 2d sections of a nickel alloy," *Ceramic Transactions*, vol. 201, pp. 771–778, 2008.
- [108] F. Wang and D. Landau, "Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states," *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 10, pp. 2050–2053, 2001.
- [109] L. Barrales-Mora, L. Shvindlerman, V. Mohles, and G. Gottstein, "The effect of grain boun-

- dary junctions on grain microstructure evolution: 3d vertex simulation,” *Materials Science Forum*, vol. 558-559, no. PART 2, pp. 1051–1056, 2007.
- [110] M. Syha and D. Weygand, “A generalized vertex dynamics model for grain growth in three dimensions,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, no. 1, 2010.
- [111] S. Kim, D. Kim, W. Kim, and Y. Park, “Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth,” *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 74, no. 6, 2006.
- [112] F. Wakai, M. Yoshida, Y. Shinoda, and T. Akatsu, “Coarsening and grain growth in sintering of two particles of different sizes,” *Acta Materialia*, vol. 53, no. 5, pp. 1361–1371, 2005.
- [113] F. Wakai, Y. Shinoda, S. Ishihara, and A. Domínguez-Rodríguez, “Topological transformation of grains in three-dimensional normal grain growth,” *Journal of Materials Research*, vol. 16, no. 7, pp. 2136–2142, 2001.
- [114] D. Rowenhorst, A. Lewis, and G. Spanos, “Three-dimensional analysis of grain topology and interface curvature in a titanium alloy,” *Acta Materialia*, vol. 58, no. 16, pp. 5511–5519, 2010.
- [115] Y. Cao, S. Allameh, D. Nankivil, S. Sethiaraj, T. Otit, and W. Soboyejo, “Nanoindentation measurements of the mechanical properties of polycrystalline au and ag thin films on silicon substrates: Effects of grain size and film thickness,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 427, no. 1-2, pp. 232–240, 2006.
- [116] P. Wo and A. Ngan, “Investigation of slip transmission behavior across grain boundaries in polycrystalline ni3al using nanoindentation,” *Journal of Materials Research*, vol. 19, no. 1, pp. 189–201, 2004.
- [117] J. Knapp, D. Follstaedt, J. Banks, and S. Myers, “Hall-petch hardening in pulsed laser deposited nickel and copper thin films,” *Materials Research Society Symposium - Proceedings*, vol. 594, pp. 69–73, 2000.
- [118] E. Schweitzer, K. Durst, D. Amberger, and M. Goken, “The mechanical properties in the vicinity of grain boundaries in ultrafine-grained and polycrystalline materials studied by nanoindentations,” *Materials Research Society Symposium Proceedings*, vol. 821, pp. 163–168, 2004.
- [119] B.-B. Jung, H.-K. Lee, and H.-C. Park, “Effect of grain size on the indentation hardness for polycrystalline materials by the modified strain gradient theory,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 50, no. 18, pp. 2719–2724, 2013.
- [120] R. Armstrong, “Engineering science aspects of the hall-petch relation,” *Acta Mechanica*,

- vol. 225, no. 4-5, pp. 1013–1028, 2014.
- [121] S. Takaki, K. Kawasaki, and Y. Kimura, “Mechanical properties of ultra fine grained steels,” *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 117, no. 3, pp. 359–363, 2001.
- [122] M. Chapetti, H. Miyata, T. Tagawa, T. Miyata, and M. Fujioka, “Fatigue strength of ultra-fine grained steels,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 381, no. 1-2, pp. 331–336, 2004.
- [123] Y. Nakai, T. Imanaka, and D. Shiozawa, “Fatigue of ultra-fine grained brass,” *Advanced Materials Research*, vol. 891-892, pp. 1125–1130, 2014.
- [124] Y. Uematsu, T. Kakiuchi, H. Miura, and T. Nozaki, “Effect of grain size on fatigue behavior in az61 mg alloys fabricated by mdfing,” *Materials Transactions*, vol. 57, no. 9, pp. 1454–1461, 2016.
- [125] N. Pugno and R. Ruoff, “Quantized fracture mechanics,” *Philosophical Magazine*, vol. 84, no. 27, pp. 2829–2845, 2004.
- [126] S. Takeuchi, “The mechanism of the inverse hall-petch relation of nanocrystals,” *Scripta Materialia*, vol. 44, no. 8-9, pp. 1483–1487, 2001.
- [127] D. Wolf and V. Yamakov, “Molecular dynamics simulation of deformation mechanisms in nanocrystalline materials,” *Bulk Nanostructured Materials*, pp. 165–199, 2009.
- [128] Y. Zhao, Z. Chen, J. Long, and T. Yang, “Influence of temperature on the inverse hall-petch effect in nanocrystalline materials: Phase field crystal simulation,” *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*, vol. 27, no. 1, pp. 81–86, 2014.
- [129] S. Lefebvre, B. Devincre, and T. Hoc, “Simulation of the hall-petch effect in ultra-fine grained copper,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 400-401, no. 1-2 SUPPL., pp. 150–153, 2005.
- [130] C. Koch and J. Narayan, “The inverse hall-petch effect - fact or artifact?,” *Materials Research Society Symposium - Proceedings*, vol. 634, pp. B5.1.1–B5.1.11, 2001.
- [131] N. Ono, R. Nowak, and S. Miura, “Effect of deformation temperature on hall-petch relationship registered for polycrystalline magnesium,” *Materials Letters*, vol. 58, no. 1-2, pp. 39–43, 2004.
- [132] J. Morris Jr., C. Lee, and Z. Guo, “The nature and consequences of coherent transformations in steel,” *ISIJ International*, vol. 43, no. 3, pp. 410–419, 2003.
- [133] C. Wang, M. Wang, J. Shi, W. Hui, and H. Dong, “Effect of microstructure refinement on the strength and toughness of low alloy martensitic steel,” *Journal of Materials Science and Technology*, vol. 23, no. 5, pp. 659–664, 2007.

- [134] M. Calcagnotto, D. Ponge, and D. Raabe, "Effect of grain refinement to 1 μm on strength and toughness of dual-phase steels," *Materials Science and Engineering A*, vol. 527, no. 29-30, pp. 7832–7840, 2010.
- [135] R. Armstrong, "Grain size dependent alumina fracture mechanics stress intensity," *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, vol. 19, no. 4-6, pp. 251–255, 2001.
- [136] D. Liu, Y. He, B. Zhang, and L. Shen, "A continuum theory of stress gradient plasticity based on the dislocation pile-up model," *Acta Materialia*, vol. 80, pp. 350–364, 2014.
- [137] G. Saada, J. Douin, F. Pettinari-Sturmel, A. Coujou, and N. Clément, "Pile-ups in thin foils: Application to transmission electron microscopy analysis of short-range-order," *Philosophical Magazine*, vol. 84, no. 8, pp. 807–824, 2004.
- [138] K. Yashiro, Y. Nakashima, and Y. Tomita, "Discrete dislocation dynamics simulation of interfacial dislocation network in gamma/gamma-prime microstructure of ni-based superalloys," *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, vol. 11, no. 2, pp. 73–80, 2006.
- [139] K. Yashiro, M. Naito, and Y. Tomita, "Molecular dynamics simulation of dislocation nucleation and motion at gamma/gamma-prime interface in ni-based superalloy," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 44, no. 9, pp. 1845–1860, 2002.
- [140] M. Meyers, A. Mishra, and D. Benson, "Mechanical properties of nanocrystalline materials," *Progress in Materials Science*, vol. 51, no. 4, pp. 427–556, 2006.
- [141] D. Balint, V. Deshpande, A. Needleman, and E. Van der Giessen, "A discrete dislocation plasticity analysis of grain-size strengthening," *Materials Science and Engineering A*, vol. 400-401, no. 1-2 SUPPL., pp. 186–190, 2005.
- [142] M. Huang, Z. Li, and J. Tong, "The influence of dislocation climb on the mechanical behavior of polycrystals and grain size effect at elevated temperature," *International Journal of Plasticity*, vol. 61, pp. 112–127, 2014.
- [143] J. Shi and M. Zikry, "Grain size, grain boundary sliding, and grain boundary interaction effects on nanocrystalline behavior," *Materials Science and Engineering A*, vol. 520, no. 1-2, pp. 121–133, 2009.
- [144] H. Hallberg and M. Ristinmaa, "Microstructure evolution influenced by dislocation density gradients modeled in a reaction-diffusion system," *Computational Materials Science*, vol. 67, pp. 373–383, 2013.
- [145] R. Kumar, L. Nicola, and E. Van der Giessen, "Density of grain boundaries and plasticity size effects: A discrete dislocation dynamics study," *Materials Science and Engineering A*,

- vol. 527, no. 1-2, pp. 7–15, 2009.
- [146] C. De Sansal, B. Devincre, and L. Kubin, “Grain size strengthening in microcrystalline copper: A three-dimensional dislocation dynamics simulation,” *Key Engineering Materials*, vol. 423, pp. 25–32, 2010.
- [147] J. Li, “A theoretical limit of fracture toughness,” *Scripta Metallurgica*, vol. 22, no. 6, pp. 837–838, 1988.
- [148] V. Lakshmanan and J. Li, “Edge dislocations emitted along inclined planes from a mode I crack,” *Materials Science and Engineering*, vol. 104, no. C, pp. 95–104, 1988.
- [149] M. Gurtin, “A finite-deformation, gradient theory of single-crystal plasticity with free energy dependent on the accumulation of geometrically necessary dislocations,” *International Journal of Plasticity*, vol. 26, no. 8, pp. 1073–1096, 2010.
- [150] T. Ruggles and D. Fullwood, “Estimations of bulk geometrically necessary dislocation density using high resolution ebsd,” *Ultramicroscopy*, vol. 133, pp. 8–15, 2013.
- [151] C. Dahlberg, Y. Saito, M. Åztop, and J. Kysar, “Geometrically necessary dislocation density measurements at a grain boundary due to wedge indentation into an aluminum bicrystal,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 105, pp. 131–149, 2017.
- [152] J. Jiang, T. Britton, and A. Wilkinson, “Measurement of geometrically necessary dislocation density with high resolution electron backscatter diffraction: Effects of detector binning and step size,” *Ultramicroscopy*, vol. 125, pp. 1–9, 2013.
- [153] F. Dunne, R. Kiwanuka, and A. Wilkinson, “Crystal plasticity analysis of micro-deformation, lattice rotation and geometrically necessary dislocation density,” *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 468, no. 2145, pp. 2509–2531, 2012.
- [154] A. Ramazani, K. Mukherjee, A. Schwedt, P. Goravanchi, U. Prahl, and W. Bleck, “Quantification of the effect of transformation-induced geometrically necessary dislocations on the flow-curve modelling of dual-phase steels,” *International Journal of Plasticity*, vol. 43, pp. 128–152, 2013.
- [155] B. Petukhov, “The statistical theory of dislocation motion in spontaneous locking-unlocking processes,” *Physics of the Solid State*, vol. 43, no. 5, pp. 845–849, 2001.
- [156] S. Limkumnerd and E. Van Der Giessen, “Statistical approach to dislocation dynamics: From dislocation correlations to a multiple-slip continuum theory of plasticity,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 77, no. 18, 2008.
- [157] J. Chevy, M. Fivel, and P. Duval, “Dislocation dynamics and strain heterogeneities in ice

- single crystals: Experiments and multiscale simulations,” *Advances in Heterogeneous Material Mechanics 2008 - Proceedings of the 2nd International Conference on Heterogeneous Material Mechanics, ICHMM 2008*, pp. 323–324, 2008.
- [158] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, M. Upadhyay, and B. Beausir, “A mesoscopic theory of dislocation and disclination fields for grain boundary-mediated crystal plasticity,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 71, pp. 277–290, 2015.
- [159] B. Raeisinia and C. Sinclair, “A representative grain size for the mechanical response of polycrystals,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 525, no. 1-2, pp. 78–82, 2009.
- [160] C. Pande and K. Cooper, “Nanomechanics of hall-petch relationship in nanocrystalline materials,” *Progress in Materials Science*, vol. 54, no. 6, pp. 689–706, 2009.
- [161] F. Lavergne, R. Brenner, and K. Sab, “Effects of grain size distribution and stress heterogeneity on yield stress of polycrystals: A numerical approach,” *Computational Materials Science*, vol. 77, pp. 387–398, 2013.
- [162] R. Dobosz, M. Lewandowska, and K. Kurzydowski, “The effect of grain size diversity on the flow stress of nanocrystalline metals by finite-element modelling,” *Scripta Materialia*, vol. 67, no. 4, pp. 408–411, 2012.
- [163] S. Cheng, J. Spencer, and W. Milligan, “Strength and tension/compression asymmetry in nanostructured and ultrafine-grain metals,” *Acta Materialia*, vol. 51, no. 15, pp. 4505–4518, 2003.
- [164] A. Mohammadabadi and K. Dehghani, “A new model for inverse hall-petch relation of nanocrystalline materials,” *Journal of Materials Engineering and Performance*, vol. 17, no. 5, pp. 662–666, 2008.
- [165] C. Pande and R. Masumura, “Yield stress of nanocrystalline materials: Role of grain size distribution,” *Processing and Properties of Structural Nanomaterial: Proceedings of Symposia held at the Materials Science and Technology 2003 Meeting*, pp. 11–17, 2003.
- [166] K. Padmanabhan, S. Sripathi, H. Hahn, and H. Gleiter, “Inverse hall-petch effect in quasi- and nanocrystalline materials,” *Materials Letters*, vol. 133, pp. 151–154, 2014.
- [167] P. Chattopadhyay, S. Pabi, I. Manna, and Y. Tomota, “On the inverse hall-petch relationship in nanocrystalline materials,” *Zeitschrift fuer Metallkunde/Materials Research and Advanced Techniques*, vol. 91, no. 12, pp. 1049–1051, 2000.
- [168] M. Gurtin and L. Anand, “Nanocrystalline grain boundaries that slip and separate: A gradient theory that accounts for grain-boundary stress and conditions at a triple-junction,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 56, no. 1, pp. 184–199, 2008.

- [169] D. Spearot and M. Sangid, "Insights on slip transmission at grain boundaries from atomistic simulations," *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, vol. 18, no. 4, pp. 188–195, 2014.
- [170] M. Horstemeyer, M. Baskes, and S. Plimpton, "Computational nanoscale plasticity simulations using embedded atom potentials," *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 37, no. 1-3, pp. 49–98, 2001.
- [171] K. Jacobsen and J. Schi \ddot{A} tz, "Computational materials science: Nansoscale plasticity," *Nature Materials*, vol. 1, no. 1, pp. 15–16, 2002.
- [172] M. Dao, L. Lu, R. Asaro, J. De Hosson, and E. Ma, "Toward a quantitative understanding of mechanical behavior of nanocrystalline metals," *Acta Materialia*, vol. 55, no. 12, pp. 4041–4065, 2007.
- [173] Y. Wang and E. Ma, "Three strategies to achieve uniform tensile deformation in a nanostructured metal," *Acta Materialia*, vol. 52, no. 6, pp. 1699–1709, 2004.
- [174] O. Ivasishin, S. Shevchenko, N. Vasiliev, and S. Semiatin, "A 3d monte carlo (potts) model for recrystallization and grain growth in polycrystalline materials," *Materials Science and Engineering A*, vol. 433, no. 1-2, pp. 216–232, 2006.
- [175] O. Ivasishin, S. Shevchenko, and S. Semiatin, "Modeling of abnormal grain growth in textured materials," *Scripta Materialia*, vol. 50, no. 9, pp. 1241–1245, 2004.
- [176] S. Bordere, "Original monte carlo methodology devoted to the study of sintering processes," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 85, no. 7, pp. 1845–1852, 2002.
- [177] A. Rollett and D. Raabe, "A hybrid model for mesoscopic simulation of recrystallization," *Computational Materials Science*, vol. 21, no. 1, pp. 69–78, 2001.
- [178] M. Miodownik, "A review of microstructural computer models used to simulate grain growth and recrystallisation in aluminium alloys," *Journal of Light Metals*, vol. 2, no. 3 SPEC., pp. 125–135, 2002.
- [179] H. Cheng, C. Huang, H. Liu, and B. Zou, "Monte carlo simulation of microstructure evolution in nanocomposite ceramic tool materials," *Computational Materials Science*, vol. 47, no. 2, pp. 326–331, 2009.
- [180] K. Phaneesh, A. Bhat, G. Mukherjee, and K. Kashyap, "On grain growth kinetics in two-phase polycrystalline materials through monte carlo simulation," *Bulletin of Materials Science*, vol. 36, no. 4, pp. 709–713, 2013.
- [181] L. Chen, "Phase field models for microstructure evolution," *Annual Review of Materials Science*, vol. 32, pp. 113–140, 2002.

- [182] C. Krill-III and L. Chen, "Computer simulation of 3d grain growth using a phase-field model," *Acta Materialia*, vol. 50, no. 12, pp. 3057–3073, 2002.
- [183] D. Weygand, Y. Brechet, and J. Lepinoux, "Zener pinning and grain growth: A two dimensional vertex computer simulation," *Acta Materialia*, vol. 47, no. 3, pp. 961–970, 1999.
- [184] A. Kuprat, "Modeling microstructure evolution using gradient-weighted moving finite elements," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 22, no. 2, pp. 535–560, 2001.
- [185] A. Kuprat, D. George, G. Straub, and M. Demirel, "Modeling microstructure evolution in three dimensions with grain3d and lagrit," *Computational Materials Science*, vol. 28, no. 2, pp. 199–208, 2003.
- [186] E. Lazar, J. Mason, R. MacPherson, and D. Srolovitz, "Complete topology of cells, grains, and bubbles in three-dimensional microstructures," *Physical Review Letters*, vol. 109, no. 9, 2012.
- [187] D. Srolovitz, G. Grest, M. Anderson, and A. Rollett, "Computer simulation of recrystallization-ii. heterogeneous nucleation and growth," *Acta Metallurgica*, vol. 36, no. 8, pp. 2115–2128, 1988.
- [188] M. Anderson, D. Srolovitz, G. Grest, and P. Sahni, "Computer simulation of grain growth i. kinetics," *Acta Metallurgica*, vol. 32, no. 5, pp. 783–791, 1984.
- [189] D. Srolovitz, M. Anderson, P. Sahni, and G. Grest, "Computer simulation of grain growth ii. grain size distribution, topology, and local dynamics," *Acta Metallurgica*, vol. 32, no. 5, pp. 793–802, 1984.
- [190] D. Srolovitz, M. Anderson, G. Grest, and P. Sahni, "Computer simulation of grain growth iii. influence of a particle dispersion," *Acta Metallurgica*, vol. 32, no. 9, pp. 1429–1438, 1984.
- [191] D. Srolovitz, G. Grest, and M. Anderson, "Computer simulation of grain growth v. abnormal grain growth," *Acta Metallurgica*, vol. 33, no. 12, pp. 2233–2247, 1985.
- [192] G. Grest, D. Srolovitz, and M. Anderson, "Computer simulation of grain growth-iv. anisotropic grain boundary energies," *Acta Metallurgica*, vol. 33, no. 3, pp. 509–520, 1985.
- [193] R. Smallman and R. Bishop, *Chapter 4 - Defects in solid*. Oxford: Butterworth-Heinemann, sixth edition ed., 1999.
- [194] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.
- [195] T. Rupert, D. Gianola, Y. Gan, and K. Hemker, "Experimental observations of stress-driven

- grain boundary migration,” *Science*, vol. 326, no. 5960, pp. 1686–1690, 2009.
- [196] V. Yamakov, D. Wolf, S. Phillpot, A. Mukherjee, and H. Gleiter, “Deformation mechanism map for nanocrystalline metals by molecular dynamics simulation,” *Nature Materials*, vol. 3, no. 1, pp. 43–47, 2004.
- [197] V. Ivanov and Y. Mishin, “Dynamics of grain boundary motion coupled to shear deformation: An analytical model and its verification by molecular dynamics,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 78, no. 6, 2008.
- [198] A. Suzuki and Y. Mishin, “Atomic mechanisms of grain boundary diffusion: Low versus high temperatures,” *Journal of Materials Science*, vol. 40, no. 12, pp. 3155–3161, 2005.
- [199] Y. Huang and F. Humphreys, “Subgrain growth and low angle boundary mobility in aluminium crystals of orientation $\{110\} \langle 001 \rangle$,” *Acta Materialia*, vol. 48, no. 8, pp. 2017–2030, 2000.
- [200] G. Gottstein, *Chapter 3 - Crystals defects*. Aachen - Germany: Springer-Verlag, first edition ed., 2014.
- [201] J. Christian and S. Mahajan, “Deformation twinning,” *Progress in Materials Science*, vol. 39, no. 1-2, pp. 1–157, 1995.
- [202] V. Randle, “Twinning-related grain boundary engineering,” *Acta Materialia*, vol. 52, no. 14, pp. 4067–4081, 2004.
- [203] Q. Xiong, J. Wang, and P. Eklund, “Coherent twinning phenomena: Towards twinning superlattices in iii-v semiconducting nanowires,” *Nano Letters*, vol. 6, no. 12, pp. 2736–2742, 2006.
- [204] M. Meyers and L. Murr, “A model for the formation of annealing twins in f.c.c. metals and alloys,” *Acta Metallurgica*, vol. 26, no. 6, pp. 951–962, 1978.
- [205] M. Rappaz and C. Gandin, “Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 41, no. 2, pp. 345–360, 1993.
- [206] W. Kurz, B. Giovanola, and R. Trivedi, “Theory of microstructural development during rapid solidification,” *Acta Metallurgica*, vol. 34, no. 5, pp. 823–830, 1986.
- [207] G. Thomas, R. de Almeida, and F. Graner, “Coarsening of three-dimensional grains in crystals, or bubbles in dry foams, tends towards a universal, statistically scale-invariant regime,” *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, vol. 74, no. 1, p. 21407, 2006.
- [208] P. Rios, G. Gottstein, and L. Shvindlerman, “Application of the thermodynamic theory of irreversible processes to normal grain growth,” *Scripta Materialia*, vol. 44, no. 6, pp. 893–897, 2001.

- [209] P. Sanders, C. Youngdahl, and J. Weertman, "The strength of nanocrystalline metals with and without flaws," *Materials Science and Engineering A*, vol. 234-236, pp. 77–82, 1997.
- [210] D. Kinderlehrer, I. Livshits, and S. Ta'asan, "A variational approach to modeling and simulation of grain growth," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 28, no. 5, pp. 1694–1715, 2006.
- [211] W. Fayad, C. Thompson, and H. Frost, "Steady-state grain-size distributions resulting from grain growth in two dimensions," *Scripta Materialia*, vol. 40, no. 10, pp. 1199–1204, 1999.
- [212] M. Elsey, S. Esedoglu, and P. Smereka, "Diffusion generated motion for grain growth in two and three dimensions," *Journal of Computational Physics*, vol. 228, no. 21, pp. 8015–8033, 2009.
- [213] V. Fradkov, A. Kravchenko, and L. Shvindlerman, "Experimental investigation of normal grain growth in terms of area and topological class," *Scripta Metallurgica*, vol. 19, no. 11, pp. 1291–1296, 1985.
- [214] R. Stoller, S. Golubov, C. Domain, and C. Becquart, "Mean field rate theory and object kinetic monte carlo: A comparison of kinetic models," *Journal of Nuclear Materials*, vol. 382, no. 2-3, pp. 77–90, 2008.
- [215] D. Raabe, "Scaling monte carlo kinetics of the potts model using rate theory," *Acta Materialia*, vol. 48, no. 7, pp. 1617–1628, 2000.
- [216] S. Hofmann, *Recrystallization of Metallic Materials*. Stuttgart: Verlag, 1978.
- [217] C. Pande, "On a stochastic theory of grain growth," *Acta Metallurgica*, vol. 35, no. 11, pp. 2671–2678, 1987.
- [218] I.-W. chen, "A stochastic theory of grain growth," *Acta Metallurgica*, vol. 35, no. 7, pp. 1723–1733, 1987.
- [219] C. Pande and E. Dantsker, "On a stochastic theory of grain growth-ii," *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 38, no. 6, pp. 945–951, 1990.
- [220] C. Pande and E. Dantsker, "On a stochastic theory of grain growth-iii," *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 39, no. 6, pp. 1359–1365, 1991.
- [221] D. Weaire and J. Glazier, "modeling grain growth and soap froth coarsening: past, present and future," *Mater. Sci. Forum*, vol. 27, no. 4, pp. 94–96, 1992.
- [222] F. Lewis, "The correlation between cell division and the shapes and sizes of prismatic cells in the epidermis of cucumis," *The Anatomical Record*, vol. 38, no. 3, pp. 341–376, 1928.
- [223] P. Feltham, "Grain growth in metals," *Acta Metallurgica*, vol. 5, no. 2, pp. 97–105, 1957.

- [224] G. Gottstein, A. Rollett, and L. Shvindlerman, “On the validity of the von neumann-mullins relation,” *Scripta Materialia*, vol. 51, no. 6, pp. 611–616, 2004.
- [225] O. Hunderi and N. Ryum, “A note on the von neumann-mullins equation,” *Scripta Materialia*, vol. 53, no. 6, pp. 719–722, 2005.
- [226] K. Teferra and B. Graham, “Tessellation growth models for polycrystalline microstructures,” *Computational Materials Science*, vol. 102, pp. 57–67, 2015.
- [227] H. Hesselbarth and I. Gobel, “Simulation of recrystallization by cellular automata,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 39, no. 9, pp. 2135–2143, 1991.
- [228] Y. Liu, T. Baudin, and R. Penelle, “Simulation of normal grain growth by cellular automata,” *Scripta Materialia*, vol. 34, no. 11, pp. 1679–1683, 1996.
- [229] D. Raabe and L. Hantcherli, “2d cellular automaton simulation of the recrystallization texture of an if sheet steel under consideration of zener pinning,” *Computational Materials Science*, vol. 34, no. 4, pp. 299–313, 2005.
- [230] A. Voss-Bohme, “Multi-scale modeling in morphogenesis: A critical analysis of the cellular potts model,” *PLoS ONE*, vol. 7, no. 9, 2012.
- [231] A. Szabo and R. Merks, “Cellular potts modeling of tumor growth, tumor invasion, and tumor evolution,” *Frontiers in Oncology*, vol. 3 APR, 2013.
- [232] J. Allen, C. Cornwell, B. Devine, and C. Welch, “Simulations of anisotropic grain growth subject to thermal gradients using q-state monte carlo,” *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 135, no. 4, 2013.
- [233] K. Phaneesh, A. Bhat, G. Mukherjee, and K. Kashyap, “Evolving close-to-real digital microstructures in polycrystalline materials a monte carlo simulation approach,” *SIMULTECH 2015 - 5th International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications, Proceedings*, pp. 118–124, 2015.
- [234] J. Dake, J. Oddershede, H. Sorensen, T. Werz, J. Shatto, K. Uesugi, S. Schmidt, and I. Krill, C.E., “Direct observation of grain rotations during coarsening of a semisolid al-cu alloy,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 113, no. 41, pp. E5998–E6006, 2016.
- [235] D. Moldovan, D. Wolf, S. Phillpot, A. Mukherjee, and H. Gleiter, “Grain-boundary diffusion-controlled stress concentration in polycrystals,” *Philosophical Magazine Letters*, vol. 83, no. 1, pp. 29–38, 2003.
- [236] J. Li, “Possibility of subgrain rotation during recrystallization,” *Journal of Applied Physics*, vol. 33, no. 10, pp. 2958–2965, 1962.

- [237] Y. Deng, J. Heringa, and H. Blote, “Constrained tricritical phenomena in two dimensions,” *Physical Review E*, vol. 71, no. 3, 2005.
- [238] H. Hu, “Direct observations on the annealing of a si-fe crystal in the electron microscope,” *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, no. 224, pp. 75–84, 1962.
- [239] D. Moldovan, D. Wolf, S. Phillpot, and A. Haslam, “Role of grain rotation during grain growth in a columnar microstructure by mesoscale simulation,” *Acta Materialia*, vol. 50, no. 13, pp. 3397–3414, 2002.
- [240] A. Vuppuluri and S. Vedantam, “Grain growth rate for coupled grain boundary migration and grain rotation in nanocrystalline materials,” *Philosophical Magazine Letters*, vol. 96, no. 9, pp. 339–346, 2016.
- [241] B. Rath, M. Winning, and J. Li, “Coupling between grain growth and grain rotation,” *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 16, 2007.
- [242] P. Hoffrogge and L. Barrales-Mora, “Grain-resolved kinetics and rotation during grain growth of nanocrystalline aluminium by molecular dynamics,” *Computational Materials Science*, vol. 128, pp. 207–222, 2017.
- [243] M. Kobayashi, Y. Takayama, and H. Kato, “Computer simulation of the influence of grain-boundary mobility on grain growth,” *Nippon Kinzoku Gakkaishi/Journal of the Japan Institute of Metals*, vol. 65, no. 6, pp. 539–545, 2001.
- [244] R. Godiksen, S. Schmidt, and D. Juul Jensen, “Molecular dynamics simulations of grain boundary migration during recrystallization employing tilt and twist dislocation boundaries to provide the driving pressure,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 16, no. 6, 2008.
- [245] K. Kurzydowski and J. Bucki, “Flow stress dependence on the distribution of grain size in polycrystals,” *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 41, no. 11, pp. 3141–3146, 1993.
- [246] E. Holm and S. Foiles, “How grain growth stops: A mechanism for grain-growth stagnation in pure materials,” *Science*, vol. 328, no. 5982, pp. 1138–1141, 2010.
- [247] J. Wejchert, D. Weaire, and J. Kermode, “Monte carlo simulation of the evolution of a two-dimensional soap froth,” *Philosophical Magazine B: Physics of Condensed Matter; Statistical Mechanics, Electronic, Optical and Magnetic Properties*, vol. 53, no. 1, pp. 15–24, 1986.
- [248] S. Offerman, N. Van Dijk, J. Sietsma, S. Grigull, E. Lauridsen, L. Margulies, H. Poulsen, M. Rekveldt, and S. Van der Zwaag, “Grain nucleation and growth during phase transformations,” *Science*, vol. 298, no. 5595, pp. 1003–1005, 2002.

- [249] L. Margulies, G. Winther, and H. Poulsen, "In situ measurement of grain rotation during deformation of polycrystals," *Science*, vol. 291, no. 5512, pp. 2392–2394, 2001.
- [250] R. Ahluwalia, T. Lookman, and A. Saxena, "Elastic deformation of polycrystals," *Physical Review Letters*, vol. 91, no. 5, pp. 555011–555014, 2003.
- [251] M. Tonks and P. Millett, "Phase field simulations of elastic deformation-driven grain growth in 2d copper polycrystals," *Materials Science and Engineering A*, vol. 528, no. 12, pp. 4086–4091, 2011.
- [252] V. Shenoy, R. Miller, E. Tadmor, R. Phillips, and M. Ortiz, "Quasicontinuum models of interfacial structure and deformation," *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 4, pp. 742–745, 1998.
- [253] R. Brenner, R. Lebensohn, and O. Castelnau, "Elastic anisotropy and yield surface estimates of polycrystals," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 46, no. 16, pp. 3018–3026, 2009.
- [254] C. Hamelin, B. Diak, and A. Pilkey, "Multiscale modelling of the induced plastic anisotropy in bcc metals," *International Journal of Plasticity*, vol. 27, no. 8, pp. 1185–1202, 2011.
- [255] R. Ghosh, R. Curtis, and M. McLean, "Creep deformation of single crystal superalloys—modelling the crystallographic anisotropy," *Acta Metallurgica Et Materialia*, vol. 38, no. 10, pp. 1977–1992, 1990.
- [256] X. Guan and X. Geng, "Stress distribution near cavity on grain boundary," *Xibei Gongye Daxue Xuebao/Journal of Northwestern Polytechnical University*, vol. 22, no. 6, pp. 726–729, 2004.
- [257] V. Vedula, S. Glass, D. Saylor, G. Rohrer, W. Carter, S. Langer, and E. Fuller Jr., "Residual-stress predictions in polycrystalline alumina," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 84, no. 3-12, pp. 2947–2954, 2001.
- [258] A. Bernard, J. Hawong, D. Shin, and H. Lim, "Internal stress distribution of x-ring using photoelastic experimental hybrid method," *Journal of Mechanical Science and Technology*, vol. 28, no. 5, pp. 1697–1708, 2014.
- [259] R. Batra and A. Pacheco, "Changes in internal stress distributions during yielding of square prismatic gold nano-specimens," *Acta Materialia*, vol. 58, no. 8, pp. 3131–3161, 2010.
- [260] R. Lin, W. Jin, M. Cao, and R. Yang, "Internal stress distribution model of the magnetomechanical hysteresis of fe-cr-al based alloys," *Journal of Materials Science and Technology*, vol. 27, no. 5, pp. 471–474, 2011.
- [261] J. Guemes, "Curing residual stresses and failure analysis in composite cylinders," *Journal*

- of Reinforced Plastics and Composites*, vol. 13, no. 5, pp. 408–419, 1994.
- [262] M. Ortiz and S. Suresh, “Statistical properties of residual stresses and intergranular fracture in ceramic materials,” *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, vol. 60, no. 1, pp. 77–84, 1993.
- [263] D. Liu and E. Winn, “Microstresses in particulate-reinforced brittle composites,” *Journal of Materials Science*, vol. 36, no. 14, pp. 3487–3495, 2001.
- [264] M. Murat, R. Engelman, and Z. Jaeger, “A numerical simulation of the rcurve behavior in microcracking materials,” *Journal of Applied Physics*, vol. 70, no. 1, pp. 158–166, 1991.
- [265] W. Skrotzki, R. Tamm, C. Oertel, B. Beckers, H. Brokmeier, and E. Rybacki, “Texture induced plastic anisotropy of nial polycrystals,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 319–321, pp. 364–367, 2001.
- [266] N. Ramaniraka and L. Rakotomanana, “Models of continuum with microcrack distribution,” *Mathematics and Mechanics of Solids*, vol. 5, no. 3, pp. 301–336, 2000.
- [267] W. Kreher, “Internal stresses and relations between effective thermoelastic properties of stochastic solids some exact solutions,” *ZAMM Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik*, vol. 68, no. 3, pp. 147–154, 1988.
- [268] K. Wierzbanski, A. Baczmanski, R. Wawszczak, J. Tarasiuk, P. Gerber, B. Bacroix, and A. Lodini, “Internal stress and stored energy in recrystallized copper,” *Archives of Metallurgy and Materials*, vol. 50, no. 1, pp. 201–208, 2005.
- [269] A. Wang, G. Yu, and J. Huang, “Fracture toughness measurement on tin hard coatings using internal energy induced cracking,” *Surface and Coatings Technology*, vol. 239, pp. 20–27, 2014.
- [270] R. Owen, R. Preston, P. Withers, H. Shercliff, and P. Webster, “Neutron and synchrotron measurements of residual strain in tig welded aluminum alloy 2024,” *Materials Science and Engineering A*, vol. 346, no. 1-2, pp. 159–167, 2003.
- [271] J. Bernier, N. Barton, U. Lienert, and M. Miller, “Far-field high-energy diffraction microscopy: A tool for intergranular orientation and strain analysis,” *Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, vol. 46, no. 7, pp. 527–547, 2011.
- [272] J. Clayton and D. Bammann, “Finite deformations and internal forces in elastic-plastic crystals: Interpretations from nonlinear elasticity and anharmonic lattice statics,” *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 131, no. 4, pp. 0412011–04120115, 2009.
- [273] O. Garishin, “Structural mechanical model of a grainy composite with a high-elasticity

- deformation-damageable matrix,” *Vysokomolekularnye Soedineniya. Ser.A Ser.B Ser.C - Kratkie Soobshcheniya*, vol. 44, no. 4, pp. 666–674, 2002.
- [274] M. Kattis and E. Providas, “Two-phase potentials in anisotropic elasticity: Antiplane deformation,” *International Journal of Engineering Science*, vol. 36, no. 7-8, pp. 801–811, 1998.
- [275] M. Akbari and J. Ghanbari, “Analytical solution of thermo-elastic stresses and deformation of functionally graded rotating hollow discs with radially varying thermo-mechanical properties under internal pressure,” *Computers, Materials and Continua*, vol. 45, no. 3, pp. 187–201, 2015.
- [276] E. Salvati and A. Korsunsky, “An analysis of macro and microscale residual stresses of type i, ii and iii using fib dic micro-ring-core milling and crystal plasticity fe modelling,” *International Journal of Plasticity*, vol. 98, pp. 123–138, 2017.
- [277] A. Benediktovitch, I. Feranchuk, and A. Ulyanenko, “X ray diffraction residual stress analysis in polycrystals,” *Springer Series in Materials Science*, vol. 183, pp. 265–311, 2014.
- [278] C. Murray and I. Cevdet Noyan, “Applied and residual stress determination using x ray diffraction,” *Practical Residual Stress Measurement Methods*, pp. 139–161, 2013.
- [279] M. Kurita, “Stress strain tensors with their application to x ray stress measurement,” *Zairyo/Journal of the Society of Materials Science, Japan*, vol. 64, no. 12, pp. 1003–1009, 2015.
- [280] K. Kozaczek, “Application of miniature x ray sources to residual stress measurements,” *Spectroscopy (Santa Monica)*, vol. 31, no. 6, 2016.
- [281] F. Delaire, J. Raphanel, and C. Rey, “Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension: Experimental study and finite element simulations,” *Acta Materialia*, vol. 48, no. 5, pp. 1075–1087, 2000.
- [282] F. Eberl, S. Forest, T. Wroblewski, G. Cailletaud, and J. Lebrun, “Finite-element calculations of the lattice rotation field of a tensile-loaded nickel-based alloy multicrystal and comparison with topographical x-ray diffraction measurements,” *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 33, no. 9, pp. 2825–2833, 2002.
- [283] P. Eriean and C. Rey, “Modeling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in if steel aggregate during large plane strain compression,” *International Journal of Plasticity*, vol. 20, no. 10, pp. 1763–1788, 2004.
- [284] J. Bardet and I. Vardoulakis, “Use of scaling functions to determine mechanical properties of thin coatings from microindentation tests,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 38, no. 2, pp. 335–351, 2000.

- [285] W. Lu and Z. Suo, "Dynamics of nanoscale pattern formation of an epitaxial monolayer," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 49, no. 9, pp. 1937–1950, 2001.
- [286] Y. Li, S. Hu, Z. Liu, and L. Chen, "Phase-field model of domain structures in ferroelectric thin films," *Applied Physics Letters*, vol. 78, no. 24, pp. 3878–3880, 2001.
- [287] M. Wrobel and K. PieÅ,a, "Basal slip localization in zinc single crystals. the considÃ're analyses," *Philosophical Magazine*, vol. 90, no. 14, pp. 1873–1891, 2010.
- [288] K. Petersen, "Silicon as a mechanical material," *Proceedings of the IEEE*, vol. 70, no. 5, pp. 420–457, 1982.
- [289] J. Wortman and R. Evans, "Young's modulus, shear modulus, and poisson's ratio in silicon and germanium," *Journal of Applied Physics*, vol. 36, no. 1, pp. 153–156, 1965.
- [290] J. Turley and G. Sines, "The anisotropy of young's modulus, shear modulus and poisson's ratio in cubic materials," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 4, no. 2, pp. 264–271, 1971.
- [291] S. Franssila, "Introduction to microfabrication," *Introduction to Microfabrication*, 2010.
- [292] J. Diz and M. Humbert, "Practical aspects of calculating the elastic properties of polycrystals from the texture according to different models," *Journal of Applied Crystallography*, vol. 25, no. pt 6, pp. 756–760, 1992.
- [293] J. Sharpe, W.N., "Mechanical properties of mems materials," *2001 International Semiconductor Device Research Symposium, ISDRS 2001 - Proceedings*, pp. 416–417, 2001.
- [294] T. Bandi, H. Shea, and A. Neels, "Mechanical properties of mems materials: Reliability investigations by mechanical-and hrxrd-characterization related to environmental testing," *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, vol. 9113, 2014.