

INFLUENCIA DE LA DENSIDAD DE DISLOCACIONES EN LA RECRISTALIZACIÓN DE MATERIALES

Carlos A. Cattaneo^a, Silvia P. Silveti^{b,c}

^a Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano Sur 1912; G4200ABT Santiago del Estero, Argentina, cacatta@unse.edu.ar

<http://faa.unse.edu.ar>

^b Facultad de Matemáticas Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina, silveti@famaf.unc.edu.ar

^c Facultad de Ingeniería, Instituto Universitario Aeronáutico, Avda. Fuerza Aérea 6500. 5000 Córdoba, Argentina.

<http://www.famaf.unc.edu.ar>

Palabras clave: Recristalización, densidad de dislocaciones, autómatas celulares, Monte Carlo.

Resumen. El proceso de recristalización en materiales es estudiado comparando diferentes modelos que utilizan un algoritmo de simulación basado en un autómata celular, para cuyas reglas se aplica Monte Carlo. Los modelos analizan, la influencia de la densidad de dislocaciones en el proceso de recristalización.

A fin de estimar la densidad de dislocaciones presente en un material que ha sido sometido a un determinado porcentaje de trabajo en frío, se desarrollan distintos modelos simples que permiten determinar la densidad de dislocaciones en función del porcentaje de trabajo en frío.

El primer modelo parte de un microcristal de material puro con forma de cubo, el cual es deformado plásticamente hasta obtener una lámina cuadrada, conservando el volumen original. Se consideran que los estiramientos se deben a la inserción de planos cristalinos que producen dislocaciones de borde, y que la reducción del espesor es por la extracción de planos cristalinos que producen dislocaciones de borde.

El segundo modelo se aplica a un microcristal de material puro con la misma forma de cubo, el cual es deformado plásticamente hasta obtener una lámina rectangular, donde un lado no cambia de longitud, conservando el volumen original. Se consideran que los estiramientos se deben a la inserción de planos cristalinos que producen dislocaciones de borde, y que la reducción del espesor es por la extracción de planos cristalinos que producen dislocaciones de borde.

Los dos modelos producen diferentes densidades de dislocaciones para el mismo porcentaje de trabajo en frío.

Los estudios de simulación se realizan en aluminio puro, y los resultados muestran la variación del porcentaje de recristalización en función del tiempo, para los distintos modelos de densidad de dislocaciones.

1 INTRODUCCION

La combinación de los procesos de trabajo en frío y de recristalización, es fundamental para el control de la evolución de la microestructura de metales. Por ello, el estudio de estos procesos es de gran importancia para la ciencia de materiales y para un amplio rango de aplicaciones industriales.

Durante la deformación plástica a bajas temperatura de metales, la mayor parte de la energía gastada en el proceso se desprende en forma de calor, mientras que el resto es almacenada por el metal como energía de deformación, asociada con diversos defectos reticulares creados por la deformación; por eso el material deformado, en comparación con el que no ha sido deformado, posee una elevada reserva de energía y se encuentra en estado de desequilibrio y termodinámicamente inestable. En este metal, incluso a temperatura ambiente, pueden ocurrir procesos espontáneos que conducen a un estado más estable. Al elevar la temperatura crece la velocidad de estos procesos (Reed Hill, 1986).

La densidad de dislocaciones en el material aumenta debido a la deformación plástica del metal. Tales dislocaciones forman una estructura metaestable de dislocaciones alrededor de los bordes de grano.

La recristalización es la formación de una nueva estructura de granos en un material deformado impulsada por la energía almacenada por deformación; estos nuevos granos nuclean y crecen hasta que los originales desaparecen completamente. Esta nueva estructura de granos está libre de la energía absorbida durante el trabajo en frío y por lo tanto también está libre de la densidad de dislocaciones producida por este trabajo.

Los factores que afectan la cinética de recristalización son: la energía de deformación almacenada en el metal, la temperatura a la cual se realiza el ensayo, la presencia de átomos en solución sólida, de partículas de segunda fase, la energía de borde de grano y la textura del material (Martin y Doherty, 1980).

Cattaneo y Silvetti en el año 2010 presentan un modelo de simulación para recristalización que tiene en cuenta la temperatura del ensayo y la energía de deformación almacenada por el trabajo en frío, mediante el porcentaje de trabajo en frío y la densidad de dislocaciones asociada. Además el modelo también considera las siguientes constantes del material: la energía de borde grano, la energía de activación para autodifusión, el módulo de corte y el vector de Burgers del material.

En la actualidad se encuentra en la bibliografía una gran cantidad de trabajos experimentales y de simulación, que intentan determinar la relación existente entre el porcentaje de trabajo en frío y la densidad de dislocaciones que se produce en el material, aunque todos ellos han sido desarrollados para materiales específicos. Roy *et al.* en 2006 realizaron los estudios en aleaciones martensíticas sometidas a pequeños porcentajes de trabajo en frío; Verdier *et al.* en 1991 analizaron una aleación de aluminio magnesio; en 2005 Benzerga *et al.* determinaron la relación utilizando un modelo plano en un cristal con estructura cristalina FCC.

El objetivo de este trabajo es el de presentar dos modelos geométricos sencillos para determinar la densidad de dislocaciones en función del trabajo en frío, y ver cómo se comportan las simulaciones de recristalización cuando se utilizan los resultados de estos modelos.

2 MODELOS PARA ESTIMAR DE LA DENSIDAD DE DISLOCACIONES EN FUNCION DEL TRABAJO EN FRIO

Cuando un metal se trabaja en frío, esto es, cuando se lo deforma plásticamente a temperatura ambiente, la energía almacenada se encuentra principalmente en forma de energía elástica en los campos de deformación que rodean a las dislocaciones y los defectos puntuales que se producen durante el proceso. Cuando aumenta el grado de deformación se eleva la densidad de dislocaciones. Así, la densidad de dislocaciones aumenta con la cantidad de trabajado en frío, por lo cual es importante encontrar una relación que vincule densidad de dislocaciones con el porcentaje de trabajo en frío aplicado al material.

Cattaneo y Silvetti en el año 2010 presentan un modelo muy simple para estimar la densidad de dislocaciones en función del trabajo en frío, en el cual un cubo se deformaba en una lámina rectangular, en este trabajo se mejora este modelo y además se propone uno nuevo en el cual el cubo se deforma en una lámina cuadrada.

2.1 MODELO PARA LÁMINA CUADRADA

Consideremos un monocristal que forma un cubo de lado l_0 como el de *figura 1*, el cual se deforma mediante trabajo en frío de tal forma que queda una lámina cuadrada de lado L y espesor l , como se muestra en la *figura 2*.

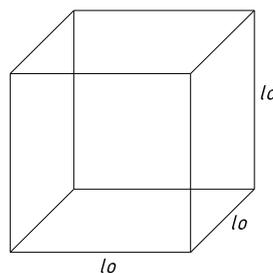


Figura 1. Monocristal sin deformación

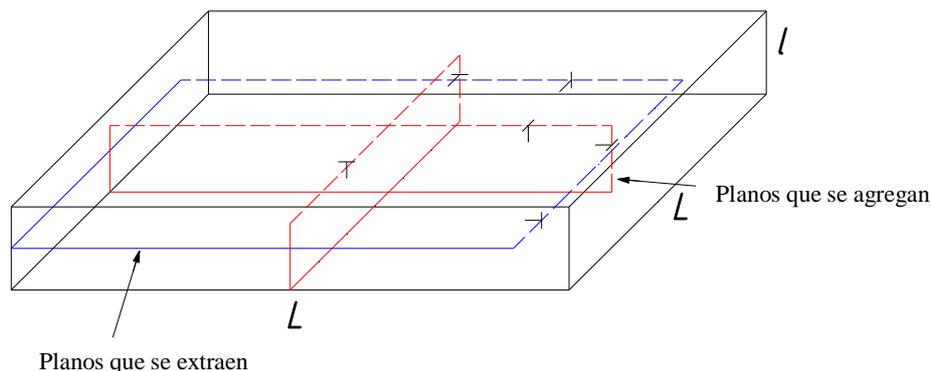


Figura 2. Monocristal deformado en forma de lámina cuadrada

Considerando que el volumen se conserva

$$V = l_0^3 = L^2 l \quad (1)$$

El área original $A_0 = l_0^2$ se reduce a $A = Ll$

El porcentaje de trabajo en frío es

$$\%cw = \frac{A_0 - A}{A_0} \times 100 \Rightarrow cw = \frac{\%cw}{100} = \frac{A_0 - A}{A_0} \quad (2)$$

Con lo cual el área final es

$$A = A_0(1 - cw) \quad (3)$$

$$Ll = A = A_0(1 - cw) \quad (4)$$

Luego

$$l_0^3 = LLl = LA = LA_0(1 - cw) \quad (5)$$

Por lo tanto, el lado que se estira toma el valor de

$$L = \frac{l_0}{(1 - cw)} \quad (6)$$

El lado que se comprime toma el valor de

$$l = \frac{l_0^3}{L^2} = l_0(1 - cw)^2 \quad (7)$$

El alargamiento es $\Delta l = L - l_0$ en cada dirección del estiramiento, se debe a m planos que agregan una dislocación de borde de longitud L y una dislocación de borde de longitud l y con vector de Burgers b , como se muestra en la *figura 2* los planos en rojo.

$$\Delta l = L - l_0 = mb \quad (8)$$

$$m = \frac{\Delta l}{b} = \frac{L - l_0}{b} = \frac{\frac{l_0}{(1 - cw)} - l_0}{b} \quad (9)$$

$$m = \frac{l_0 cw}{b(1 - cw)} \quad (10)$$

La longitud de la dislocación agregada por el plano extra es $L + l$

$$L + l = \frac{l_0}{(1 - cw)} + l_0(1 - cw)^2 = \frac{l_0(1 + (1 - cw)^3)}{(1 - cw)} \quad (11)$$

Luego tenemos dos direcciones, en las que aumenta la longitud de la arista del paralelepípedo, la longitud total de dislocaciones es $2m(L + l)$, y la densidad de dislocaciones es

$$\rho_L = \frac{2m(L + l)}{V} = 2 \frac{l_0 cw}{b(1 - cw)} \frac{l_0(1 + (1 - cw)^3)}{(1 - cw)} \frac{1}{l_0^3} \quad (12)$$

$$\rho_L = \frac{2cw(1+(1-cw)^3)}{bl_0(1-cw)^2} \quad (13)$$

Si consideramos que para reducir el espesor de l_0 a l sacamos n planos cuyos bordes nos generan dos dislocaciones de largo L , con vector de Burgers b como indica la *figura 2* plano en color azul, obtenemos

$$L + L = 2L = \frac{2l_0}{(1-cw)} \quad (14)$$

El acortamiento es

$$\Delta l = l_0 - l = l_0 - l_0(1-cw)^2 = l_0(1-(1-cw)^2) = nb \quad (15)$$

$$n = \frac{l_0(1-(1-cw)^2)}{b} \quad (16)$$

La densidad de dislocaciones que aporta la reducción de espesor es

$$\rho_l = \frac{n(L+L)}{V} = \frac{l_0(1-(1-cw)^2)}{b} \frac{l_0}{(1-cw)l_0^3} \cdot 2 \quad (17)$$

$$\rho_l = \frac{2(1-(1-cw)^2)}{bl_0(1-cw)} \quad (18)$$

Sumando las dos densidades de dislocaciones obtenemos la densidad total de dislocaciones

$$\rho = \rho_L + \rho_l \quad (19)$$

$$\rho = \frac{2cw(1+(1-cw)^3)}{bl_0(1-cw)^2} + \frac{2(1-(1-cw)^2)}{bl_0(1-cw)} \quad (20)$$

$$\rho = \frac{2}{bl_0} \left(\frac{cw(1+(1-cw)^3)}{(1-cw)^2} + \frac{(1-(1-cw)^2)}{(1-cw)} \right) \quad (21)$$

2.2 MODELO PARA LÁMINA RECTANGULAR

Como en el caso anterior, partimos de un monocristal que forma un cubo de lado l_0 como el de la figura 1, el cual se deforma mediante trabajo en frío de tal forma que queda una lámina rectangular de lados l_0 y L con espesor l , como se muestra en la *figura 3*

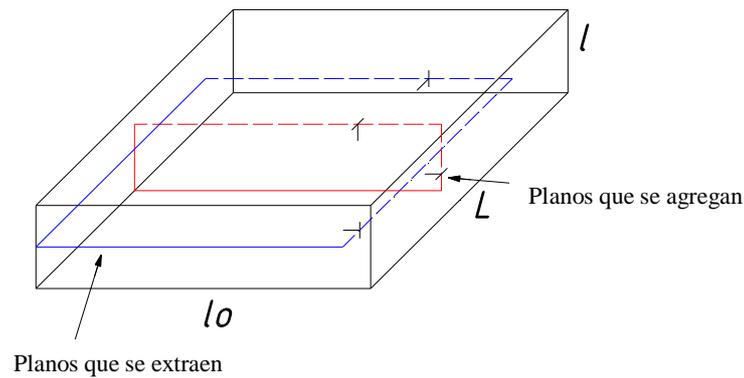


Figura 3. Monocristal deformado en forma de lámina rectangular

Considerando que el volumen se conserva

$$V = l_0^3 = l_0 Ll \quad (22)$$

El área original $A_0 = l_0^2$ se reduce a $A = l_0 l$

El porcentaje de trabajo en frío es

$$\% cw = \frac{A_0 - A}{A_0} \times 100 \Rightarrow cw = \frac{\% cw}{100} = \frac{A_0 - A}{A_0} \quad (23)$$

Con lo cual el área final es

$$A = A_0(1 - cw) \quad (24)$$

$$l_0 l = A = A_0(1 - cw) \quad (25)$$

Luego

$$l_0^3 = l_0 Ll = LA = LA_0(1 - cw) \quad (26)$$

Por lo tanto los lados que se deforman toman los valores de

$$L = \frac{l_0}{(1 - cw)} \quad (27)$$

$$l = \frac{l_0^3}{l_0 L} = l_0(1 - cw) \quad (28)$$

El alargamiento es $\Delta l = L - l_0$ en cada dirección del estiramiento, se debe a m planos que agregan una dislocación de borde de longitud L y una dislocación de borde de longitud l y con vector de Burgers b , plano rojo en la *figura 3*

$$\Delta l = L - l_0 = mb \quad (29)$$

$$m = \frac{\Delta l}{b} = \frac{L - l_0}{b} = \frac{\frac{l_0}{(1 - cw)} - l_0}{b} \quad (30)$$

$$m = \frac{l_0 cw}{b(1 - cw)} \quad (31)$$

La longitud de la dislocación agregada por el plano extra es $l_0 + l$

$$l_0 + l = l_0 + l_0(1 - cw) = l_0(2 - cw) \quad (32)$$

Si consideramos que para reducir el espesor de l_0 a l sacamos n planos cuyos bordes nos generan dos dislocaciones de largo $L + l_0$, con vector de Burgers, plano azul en la [figura 3](#), obtenemos

$$\Delta l = l_0 - l = nb \quad (33)$$

$$n = \frac{l_0(1 - (1 - cw))}{b} = \frac{l_0 cw}{b} \quad (34)$$

$$L + l_0 = \frac{l_0}{(1 - cw)} + l_0 = \frac{l_0(2 - cw)}{(1 - cw)} \quad (35)$$

La densidad de dislocaciones está formada por las dislocaciones que se agregan por el estiramiento, más las que se forman por la reducción de espesor

$$\rho = \frac{m(l_0 + l) + n(L + l_0)}{V} \quad (36)$$

$$\rho = \frac{2cw(2 - cw)}{bl_0(1 - cw)} \quad (37)$$

Si consideramos que el tamaño inicial del microcristal l_0 es el tamaño medio de grano del material policristalino las ecuaciones [21](#) y [37](#), indican la densidad de dislocaciones en función del trabajo en frío y del tamaño de la microestructura del material, para cada modelo.

En la [figura 4](#) se muestran las gráficas de las ecuaciones [21](#) y [37](#), para el aluminio, caracterizado por el vector de Burgers de 0,3 nm, y para un tamaño de grano de 10 micrones.

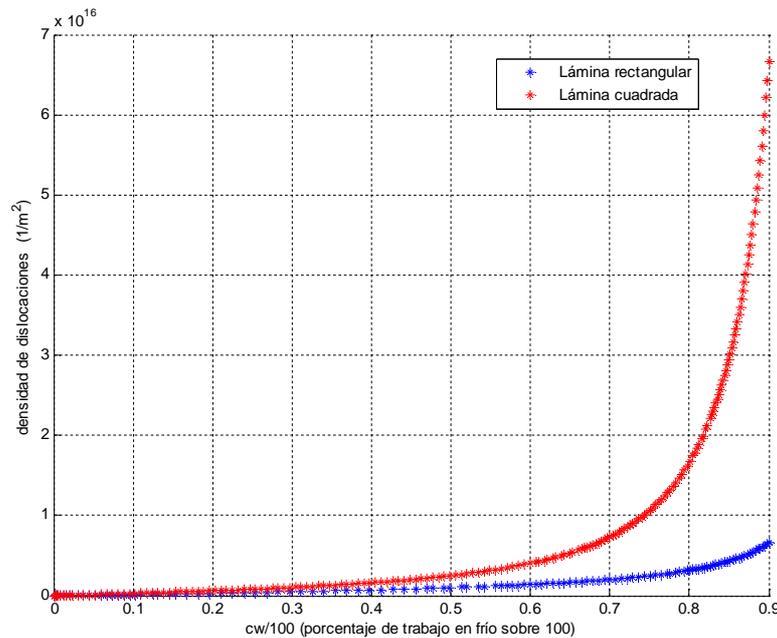


Figura 4. Gráfico de la densidad de dislocaciones en función del trabajo en frío, con vector de Burgers de 0,3 nm, y para un tamaño de grano de 10 micrones.

En la *figura 4* podemos ver que para porcentajes de trabajo en frío menor a 30%, casi no hay diferencia en la densidad de dislocaciones estimada por cada modelo, pero para porcentajes mayores la densidad de dislocaciones propuesta por el modelo de lámina cuadrada crece mucho más rápido que la propuesta por el modelo de lámina rectangular, llegando a ser un orden de magnitud mayor para porcentajes de trabajo mayores al 75%.

3 RESULTADOS

Para estudiar la influencia de cada modelo en la recrystalización se utilizó el algoritmo desarrollado por *Cattaneo y Silveti* en 2010, el cual se basa en autómatas celulares y Monte Carlo, similar al propuesto por Cattaneo y Silveti en 2008 y 2009, aplicado a crecimiento de grano.

En este trabajo se estudió un sistema constituido por muestras de aluminio puro las que han sido sometidas a distintos porcentajes de trabajo en frío respectivamente.

Se analizó aluminio puro utilizando los siguientes valores característicos:

$$Q = 15000 \text{ Cal/mol}, \gamma = 0,6 \text{ J/m}^2, T_f = 933^\circ\text{K}, G = 26 \cdot 10^9 \text{ N/m}^2, b = 0,286 \cdot 10^{-9} \text{ m}.$$

Se definió un microcristal de $0,8 \cdot 10^{-6}$ m de lado, y una matriz inicial de grano con un tamaño medio de grano de $10,97 \mu\text{m}$.

Las temperaturas seleccionadas para realizar las simulaciones fueron: 573°K , 673°K , 773°K y 873°K .

Para estudiar cómo influye la relación entre la densidad de dislocaciones y el porcentaje de trabajo en frío en la recrystalización, se construyó una matriz de densidad de dislocaciones. En la matriz se colocó, en los sitios de los microcristales que están en los bordes de grano, la mayor densidad de dislocaciones y esta densidad fue disminuyendo para los sitios de microcristales en el interior de los granos, tal como las mostradas por Cattaneo y Silveti en 2010, luego se determinó la densidad de dislocaciones promedio en toda la muestra y se relacionó con el porcentaje de trabajo en frío para cada modelo.

Las densidades de dislocaciones promedio utilizadas fueron: $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$ que corresponde a un porcentaje de trabajo en frío de 45.5% para el modelo de lámina cuadrada y de 70% para el modelo de lámina rectangular. Y $\rho = 7.35 \cdot 10^{16} \text{ 1/m}^2$ que corresponde a un porcentaje de trabajo en frío de 70% para el modelo de lámina cuadrada.

En la *figura 5* se muestran los resultados de las simulaciones de recrystalización, utilizando el modelo de densidad de dislocaciones para lámina cuadrada, para una deformación correspondiente a un 45.5% de trabajo en frío, que corresponde a una densidad de dislocaciones de $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$.

En la *figura 6* se muestran los resultados de las simulaciones de recrystalización, utilizando el modelo de densidad de dislocaciones para lámina rectangular, para una deformación correspondiente a un 70% de trabajo en frío, lo que significa que corresponde a la misma densidad de dislocaciones del caso anterior.

En la *figura 7* se muestran los resultados de las simulaciones de recrystalización, utilizando el modelo de densidad de dislocaciones para lámina cuadrada, para una deformación correspondiente a un 70% de trabajo en frío, la cual corresponde a una densidad de dislocaciones de $\rho = 7.35 \cdot 10^{16} \text{ 1/m}^2$.

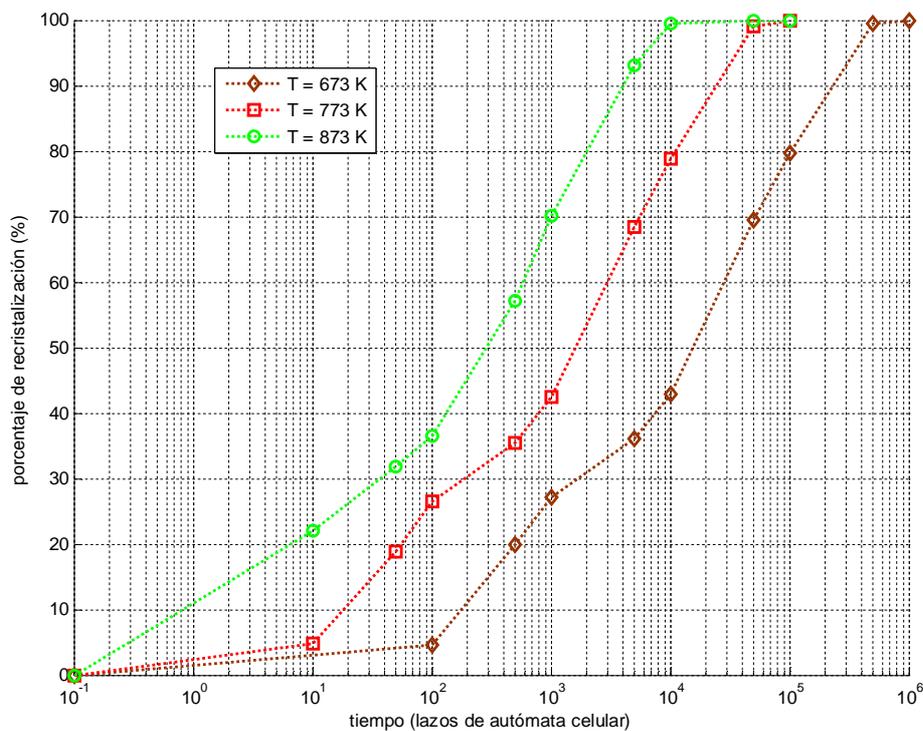


Figura 5. Recrystalización para el modelo de lámina cuadrada, con un 45.5% de porcentaje de trabajo en frío y densidad de dislocaciones de $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$

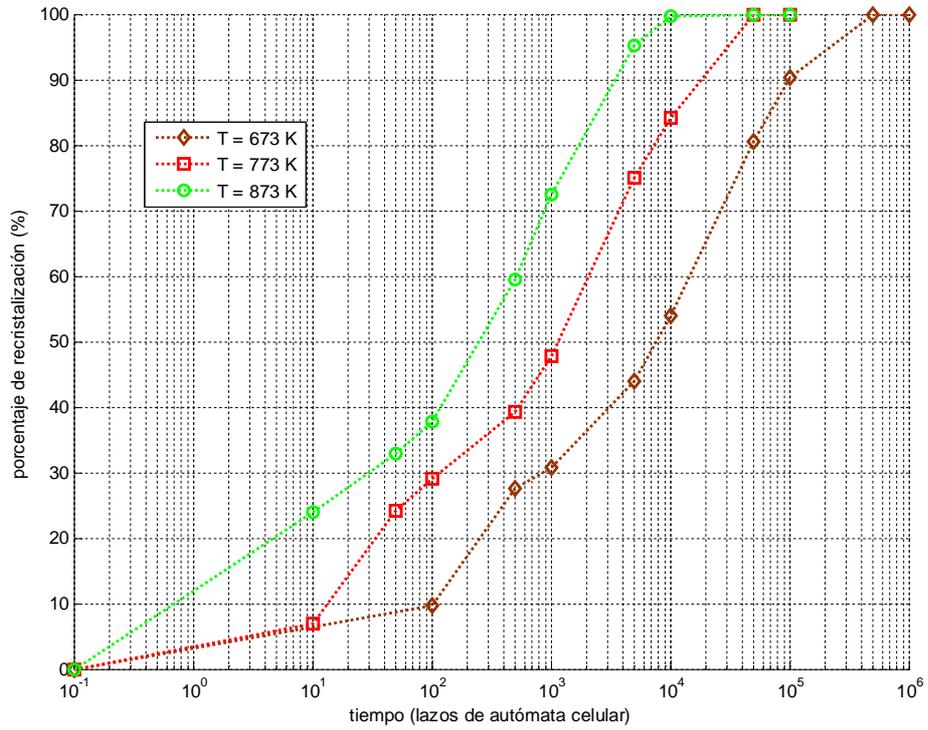


Figura 6. Recristalización para el modelo de lámina rectangular, con un 70% de porcentaje de trabajo en frío y densidad de dislocaciones de $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$

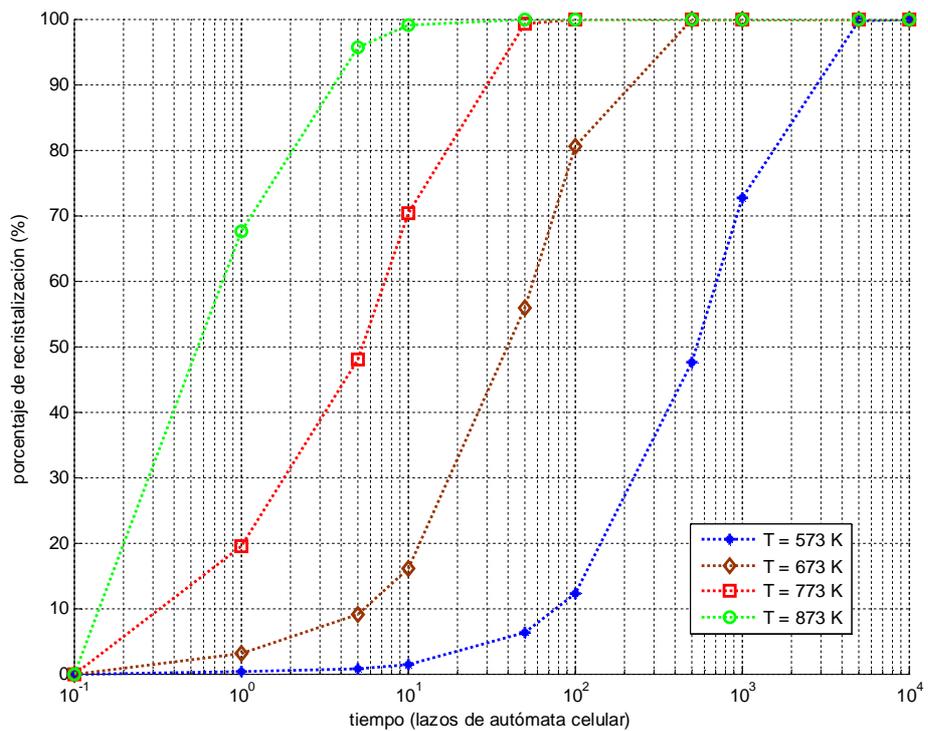


Figura 7. Recristalización para el modelo de lámina cuadrada, con un 70% de porcentaje de trabajo en frío y densidad de dislocaciones de $\rho = 7.35 \cdot 10^{16} \text{ 1/m}^2$

Se observa de las figuras 6 y 7 que la velocidad de recristalización es mucho mayor para el modelo de lámina cuadrada que para el modelo de lámina rectangular, aunque ambas gráficas corresponden para el mismo porcentaje de trabajo en frío, los modelos proponen distintas densidades de dislocaciones, siendo mayor la propuesta por el modelo de lámina cuadrada. Los resultados indican que el algoritmo es muy sensible a la densidad de dislocaciones y que, a mayor densidad de dislocaciones, mayor es la velocidad de recristalización.

En la figura 8 se superponen los gráficos 5 y 6 para analizar la influencia del porcentaje de trabajo en frío en el algoritmo, en este caso ambos modelos se aplicaron con la misma densidad de dislocaciones $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$ y distinto porcentaje de trabajo en frío, 70% para lámina rectangular y 45.5% para lámina cuadrada. En la misma podemos observar que a medida que la temperatura del ensayo disminuye, la velocidad de recristalización es mayor para el mayor porcentaje de trabajo en frío modelo de lámina rectangular, mientras que para alta temperatura 873 °K casi no hay diferencia en las curvas de recristalización.

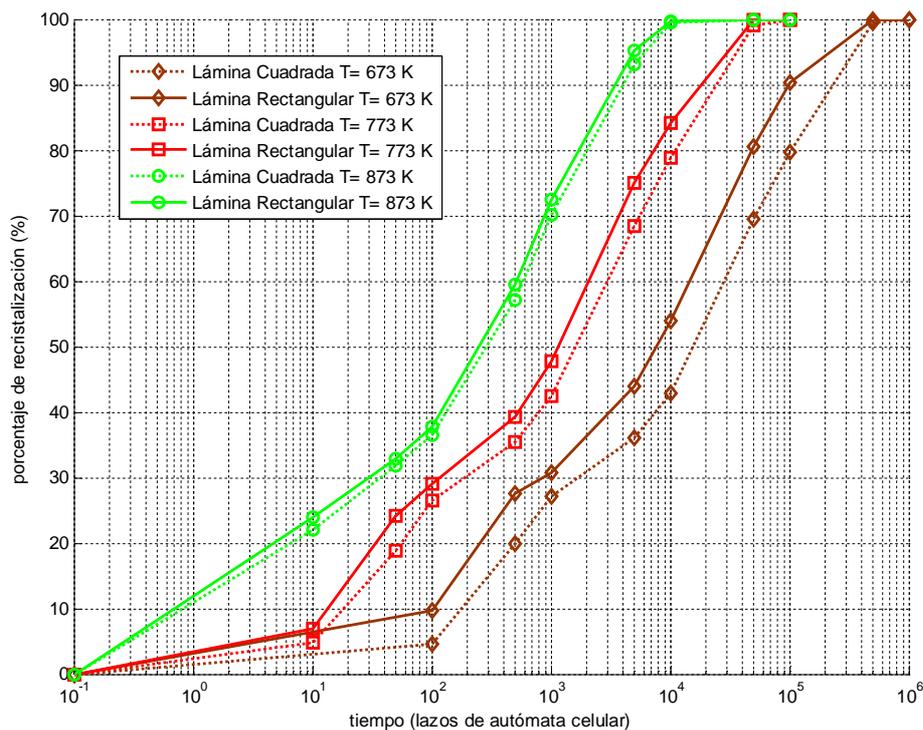


Figura 8. Comparación de recristalización, para los modelos de lámina cuadrada (45.4% cw) y lámina rectangular (70% cw), y densidad de dislocaciones de $\rho = 2.05 \cdot 10^{15} \text{ 1/m}^2$

4 CONCLUSIONES

Se presentan dos modelos que permiten relacionar el porcentaje de trabajo en frío realizado sobre un metal con la densidad de dislocaciones que presenta el material, *ecuación 21* para el modelo de lámina cuadrada y *ecuación 37* para el modelo de lámina rectangular.

Se observa que a igual porcentaje de trabajo en frío, la recristalización es mayor a mayor densidad de dislocaciones figuras 6 y 7.

Para igual valor de densidad de dislocaciones debemos tener en cuenta la temperatura del ensayo para considerar el efecto del porcentaje de trabajo en frío (*figura 8*). Mientras más baja es la temperatura, la velocidad de recristalización es mayor a mayor porcentaje de trabajo en frío, mientras que a medida que aumenta la temperatura esta diferencia tiende a desaparecer.

REFERENCIAS

- Benzerga, A.A; Brechet, Y.; Needleman, A.; Huyesen, E. Van der. The stored energy of cold work: Predictions from discrete dislocation plasticity. *Acta Materialia* 53: 4765–4779. 2005
- Cattaneo, C.A.; Silvetti, S.P. Modelo híbrido para el crecimiento de grano aplicando autómatas celulares y método de Monte Carlo. *Mecánica Computacional*. Vol XXVII: 2385-2395. 2008
- Cattaneo, C.A.; Silvetti, S.P. Efectos de la difusión en borde de grano en el crecimiento anormal de grano. *Mecánica Computacional* Vol XXVIII: 2425-2433. 2009
- Cattaneo, C.A.; Silvetti, S.P. Modelo de recristalización considerando densidad de dislocaciones – Simulación para. *Mecánica Computacional* Vol XXIX: 2125-2139. 2010
- Martin, J. W and Doherty, R. D. *Stability of Microstructure in Metallic System*. Cambridge Solid State Science Series. 1980
- Reed Hill, R.E. *Principios de Metalurgia Física*. Cia. Editorial continental 1986
- Roy, A.K; Bandyopadhyay, S; Suresh, S.B; Maitra, D; Kumara, P; Wells, D; Mac, L. Relationship of residual stress to dislocation density in cold-worked martensitic alloy *Materials Science and Engineering A* 416: 134–138. 2006
- Verdier, M; Groma, I; Flandin, L; Lendvai, J; Brkhet, Y. and Guyot, P. Dislocation densities and stored energy after cold rolling of al-mg alloys: investigations by resistmty and differential scanning calorimetry. *Scripta Mater*, Vol. 31, No. 4: pp. 449-454. 1991.