

CINETICA DE RECRISTALIZACION EN ALEACIONES BIFASICAS

Carlos A. Cattaneo^a, Silvia P. Silvetti^{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, silvetti@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, Aleaciones bifásicas, Autómata celular.

Resumen. El estudio de la cinética de recristalización de aleaciones bifásicas es de gran importancia, pues se puede predecir la microestructura del material luego del tratamiento térmico correspondiente. Para ello, se presenta un algoritmo que permite simular la recristalización en sistemas bifásicos, basado en un autómata celular con reglas de selección que usan el método de Monte Carlo. El mismo permite variar: la energía de borde de grano y la auto difusión del material, el tamaño y la fracción de partículas de segunda fase, la temperatura del ensayo, el porcentaje de trabajo en frío y la distribución de densidad de dislocaciones de la probeta. Además, mediante un proceso de crecimiento normal de grano, el algoritmo permite que la nueva fase recristalizada siga evolucionando en el tiempo. Los resultados muestran la evolución de la recristalización en el tiempo, mostrando el característico perfil en S o sigmoidal de las curvas de recristalización, donde la velocidad de transformación es baja en el comienzo de la misma y al finalizar, pero rápida en los estadios intermedios. También se estudian los efectos del aumento de la temperatura de ensayo y del porcentaje de trabajo en frío en la cinética del proceso de recristalización. Por otra parte, los resultados obtenidos de las simulaciones se analizan mediante la ecuación Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA), que describe las transformaciones de fase a temperatura constante, observando cómo varía el coeficiente de Avrami (n) con la distribución de partículas de segunda fase y con la temperatura del ensayo.

1 INTRODUCCION

La recrystalización, incluye la nucleación y el crecimiento de nuevos granos con baja densidad de dislocaciones a expensas de los granos deformados. Los nuevos granos crecen por migración de ángulo alto y su orientación puede ser diferente a la de la zona deformada que los rodea. Durante este proceso disminuye considerablemente la resistencia del material, mientras que la ductilidad aumenta.

La nucleación tiene lugar a tiempos cortos, mientras que la fracción recrystalizada sigue siendo pequeña. Luego los primeros granos nucleados empiezan a crecer y la fracción de material recrystalizado aumenta rápidamente, hasta que termine la nucleación y los granos recrystalizados choquen, aquí el proceso pierde velocidad y las últimas zonas sin recrystalizar tardan en transformarse.

Burke y Turnbull (1952) proponen que la recrystalización es un proceso de nucleación y crecimiento controlado por la activación térmica y cuya fuerza motriz es la energía almacenada en forma de dislocaciones. Los micromecanismos que controlan la recrystalización son activados térmicamente y la relación entre la velocidad de recrystalización y la temperatura viene dada por una ecuación tipo Arrhenius, mientras que se requiere una deformación mínima para que se produzca la recrystalización. La deformación introduce en el material un gran número de dislocaciones, teniendo cada una de ellas una energía asociada, sin esto la nucleación no se iniciaría y los granos nuevos no podrán crecer si esa energía es insuficiente.

Conforme aumenta la deformación la temperatura de recrystalización disminuye, ya que la fuerza impulsora de la recrystalización viene dada por las dislocaciones presentes en el material deformado. Cuanto mayor es la deformación más rápido será el proceso de nucleación y crecimiento o más baja la temperatura mínima requerida para que se pueda transformar el material.

El tamaño de grano recrystalizado depende de la deformación acumulada en el material, cuanto mayor es la deformación más pequeño es el tamaño de grano recrystalizado. La influencia de la deformación sobre la nucleación es mayor que sobre el crecimiento de grano. Por lo tanto, en un material más deformado se nuclearán más granos nuevos por unidad de volumen y el tamaño de grano final será más pequeño.

Los factores importantes a la hora de estudiar la recrystalización son:

- El grado de deformación. La cantidad de la deformación almacenada en el material determina no solamente la energía disponible para el inicio de la recrystalización, sino también el tipo de nucleación y los lugares donde nuclean los nuevos granos.
- El tamaño de grano inicial. Hay varios efectos que condicionan que la recrystalización sea más rápida en los materiales con un reducido tamaño de grano.
- Los elementos en solución sólida. La influencia de los elementos en solución sólida (Mn, P, Si, entre otros) sobre la migración de las fronteras de grano es importante y un pequeño aumento de las impurezas en solución sólida puede reducir la movilidad en varios órdenes de magnitud como lo explica (Dimitrov et al 1978).
- Las partículas de segunda fase. Los precipitados en las aleaciones juegan un papel muy importante, tanto en el proceso de la nucleación como durante el crecimiento del grano recrystalizado. El tamaño de las partículas, y en menor medida su distribución, determinan si éstas inducen a la nucleación o si, al contrario, pueden llegar a inhibir la migración de fronteras de grano por pinzamiento de las mismas. Numerosos estudios (Humphreys y Hatherly 2004) han demostrado que la estimulación de la nucleación por las partículas de segunda fase ocurre cuando las

precipitaciones son de gran tamaño, mientras que el pinzamiento de las fronteras (conocido como el efecto de Zener) es un efecto de las partículas pequeñas.

La cinética del proceso de recristalización se puede describir mediante el modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (Humphreys y Hatherly 2004). En este modelo se asume que los núcleos se forman con una velocidad N y que van consumiendo la matriz deformada con una velocidad G . En el caso general se puede describir la evolución de la fracción recristalizada F_r de la siguiente manera (ecuación 1):

$$F_r = 1 - \exp(-St^n) \quad (1)$$

donde n es el coeficiente de Avrami, t el tiempo de recocido y S es una constante que incluye ambas velocidades N y G . Esta constante responde a la ley de Arrhenius y se define de cómo

$$S = S_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2)$$

donde S_0 es una constante que es función de otros parámetros, como la composición química, el tamaño de grano o la reducción en frío, Q es la energía de activación para la recristalización, R la constante de los gases perfectos y T es la temperatura absoluta.

El objetivo de este trabajo es el de presentar un algoritmo que permite realizar simulaciones de recristalización en un sistema bifásico, teniendo en cuenta la fracción de partículas de segunda fase, el tamaño de éstas y la distribución de densidad de dislocaciones en el material.

2 MODELO PARA LA SIMULACION

Para realizar las simulaciones de recristalización en los sistemas bifásicos se modificó el algoritmo presentado por Cattaneo y Silvetti en 2010 para recristalización en sistemas monofásicos, y se le agregaron las condiciones necesarias para considerar las partículas de segunda fase iguales a las propuestas por Cattaneo y Silvetti en 2008 y 2009 para crecimiento de grano, considerando la insolubilidad total de las partículas de segunda fase, que tienen tamaño fijo y están distribuidas uniformemente en la matriz del metal.

Para la distribución de la densidad de dislocaciones en la matriz se utilizó el modelo de lámina rectangular desarrollado por Cattaneo y Silvetti en 2011.

Así la densidad de dislocaciones en la matriz está dada por:

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

Donde cw es el porcentaje de trabajo en frío, b el vector de Burgers y l_0 el tamaño de grano.

También se consideró que la distribución uniforme de partículas de segunda fase produce una separación media entre ellas dada por

$$\lambda = \left(\frac{4f}{3}\right)^{1/3} \left(\frac{1}{F_{sf}}\right)^{1/3} R_p \quad (4)$$

Donde F_{sf} es la fracción volumétrica de particular de segunda fase y R_p es el radio medio de la partícula de segunda fase.

Como se puede observar en la ecuación 4 la separación entre las partículas de segunda fase en una distribución uniforme, es directamente proporcional al radio de la partícula de segunda fase e inversamente proporcional a la raíz cúbica de la fracción de partículas de segunda fase.

Para construir la matriz de densidad de dislocaciones, primero se determinó la densidad de dislocaciones para el sistema monofásico utilizando la [ecuación 3](#) con el tamaño inicial de grano, colocando 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 Silvetti en [2010](#).

Posteriormente se determinó la densidad de dislocaciones promedio en toda la muestra y se relacionó con el porcentaje de trabajo en frío. En un segundo paso, para tener en cuenta la influencia de la distribución de partículas de segunda fase en el proceso de recrystalización, se consideró que las partículas anclan a las dislocaciones y se recalculó la densidad de dislocaciones para el porcentaje de trabajo en frío determinado anteriormente alrededor de las partículas mediante la misma [ecuación 3](#) pero considerando ahora la separación entre las partículas de segunda fase }.

3 RESULTADOS

Se estudió un sistema constituido por aluminio con partículas de segunda fase insolubles.

Los parámetros utilizados para el aluminio son:

- Calor de difusión en borde de grano $Q = 15000$ Cal/mol
- Energía de borde de grano $\chi = 0,6$ J/m²
- Temperatura de fusión $T_f = 933$ K
- Módulo de corte $G = 26 \cdot 10^9$ N/m²
- Módulo del vector de Burgers $b = 0,286 \cdot 10^{-9}$ 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 $10,97$ μ m.

Los sistemas de segunda fase analizados fueron:

- para partículas de radio $0,4$ μ m se usaron fracciones de partícula de segunda fase de $0,02$; $0,04$ y $0,06$
- para la fracción de partículas de segunda fase de $0,06$ se usaron partículas de $0,4$ μ m , $1,2$ μ m y $2,0$ μ m de radio.

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

Los porcentajes de trabajo en frío usados en cada sistema fueron:

- 73% para $F_{sf} = 0,02$ y $R_p = 0,4$ μ m
- 75% para $F_{sf} = 0,04$ y $R_p = 0,4$ μ m
- 75% para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 0,4$ μ m
- 71% para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 1,2$ μ m
- 71% para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 2,0$ μ m

La separación de partículas de segunda fase calculadas mediante la [ecuación 4](#) de estos sistemas son:

- } = $2,38$ μ m para $F_{sf} = 0,02$ y $R_p = 0,4$ μ m
- } = $1,89$ μ m para $F_{sf} = 0,04$ y $R_p = 0,4$ μ m
- } = $1,65$ μ m para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 0,4$ μ m
- } = $4,94$ μ m para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 1,2$ μ m
- } = $8,24$ μ m para $F_{sf} = 0,06$ y $R_p = 2,0$ μ m

En la [figura 1](#) se muestran los resultados de las simulaciones de recrystalización, para el sistema con fracción de partícula de segunda fase de $0,02$ y tamaño de partícula de $0,4$ μ m, para las distintas temperaturas de ensayos elegidas. En ella podemos apreciar que la

recristalización de sistemas bifásicos es un fenómeno activado térmicamente y que la velocidad de recristalización aumenta a medida que aumenta la temperatura del ensayo.

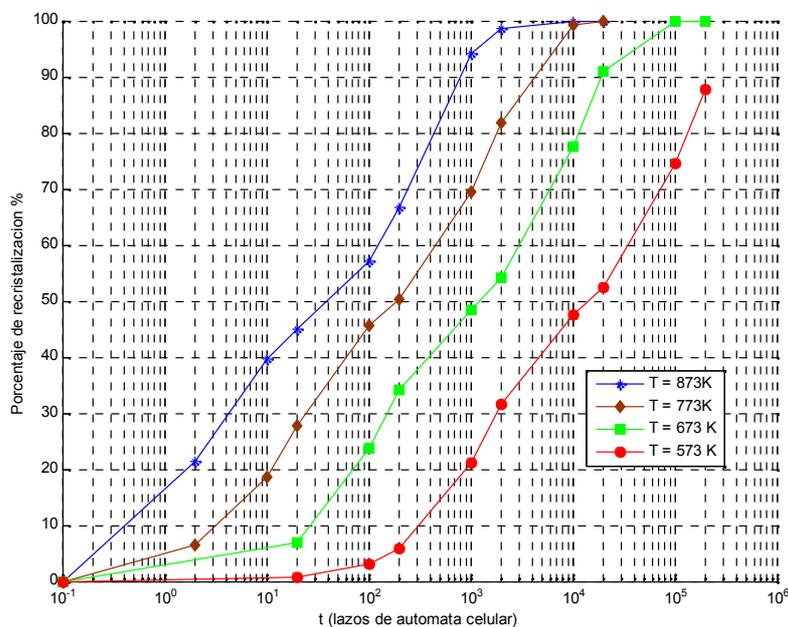


Figura 1. Recristalización para el sistema bifásico $F_{sf} = 0,02$ y $R_p = 0,4$ mm

En la figura 2 se muestran los resultados de las simulaciones de recristalización, para todos los sistemas estudiados a la temperatura de 673K, en ella podemos observar como varía la recristalización para las distintas distribuciones y tamaños de partículas de segunda fase.

Cuando el tamaño de partícula es fijo la velocidad de recristalización aumenta si se incrementa la fracción de partículas de segunda fase, mientras que para fracción de partículas de segunda fase constante la velocidad de recristalización disminuye con el aumento de tamaño de la partícula.

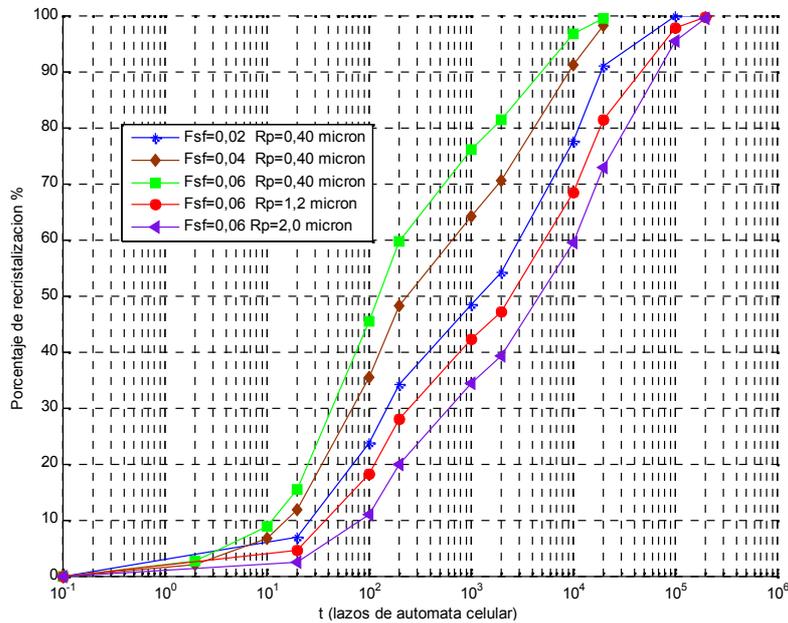


Figura 2. Recristalización de los diferentes sistemas bifásicos a la temperatura de 673K

Para ver la cinética de recristalización se construyeron los gráficos JMAK, a fin de determinar el coeficiente de Avrami n . Para ello la ecuación 1 fue linealizada y se construyó el gráfico correspondiente.

En la figura 3 se muestran los gráficos JMAK del sistema de fracción de partícula de segunda fase de 0,02 y tamaño de partícula de 0,4 μm , para las distintas temperaturas de ensayos elegidas. En ella podemos apreciar cómo aumenta el valor del coeficiente de Avrami a medida que disminuye la temperatura del ensayo.

En la figura 4 se muestran los gráficos JMAK para todos los sistemas estudiados a la temperatura de 673K. En ella puede verse cómo aumenta el valor del coeficiente de Avrami cuando se mantiene fijo el tamaño de partícula y se aumenta la fracción de partículas de segunda fase.

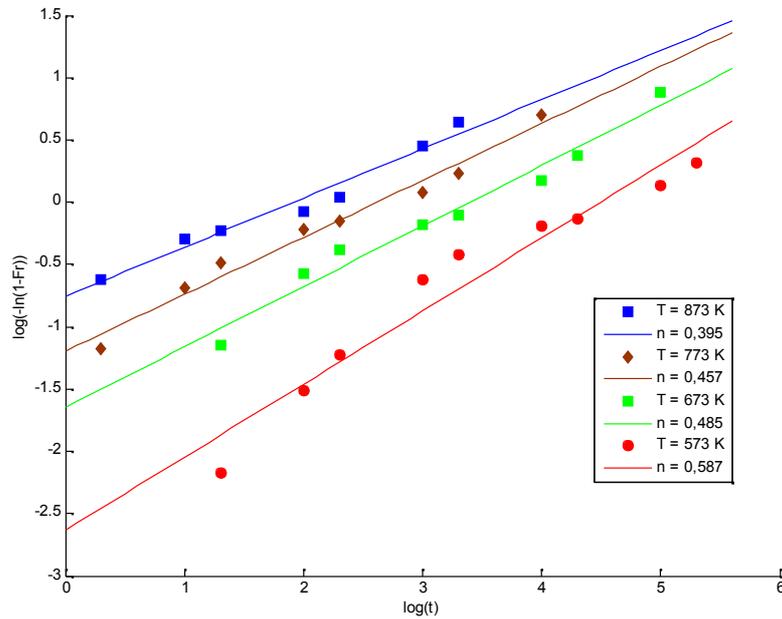


Figura 3. Gráficos JMAK para el sistema bifásico $F_{sf} = 0,02$ y $R_p = 0,4$ mm

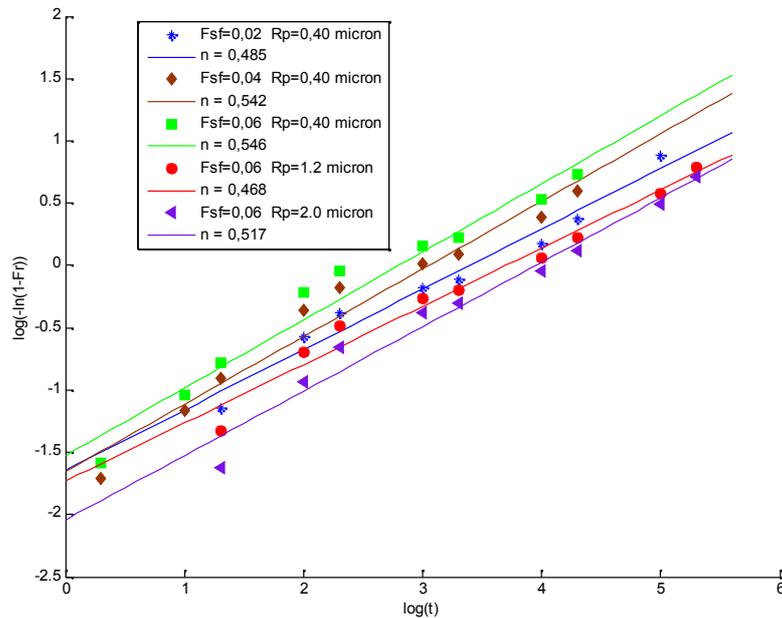


Figura 4. Gráficos JMAK de los diferentes sistemas bifásicos a la temperatura de 673K

En la figura 5 se muestra la evolución de la microestructura para el sistema de $F_{sf} = 0,04$ y $R_p = 0,4 \mu\text{m}$ a 673K, durante la recrystalización. Se puede apreciar que la recrystalización se inicia en las partículas de segunda fase, continua en los bordes de grano y finalmente se produce el crecimiento de los nuevos granos recrystalizados.

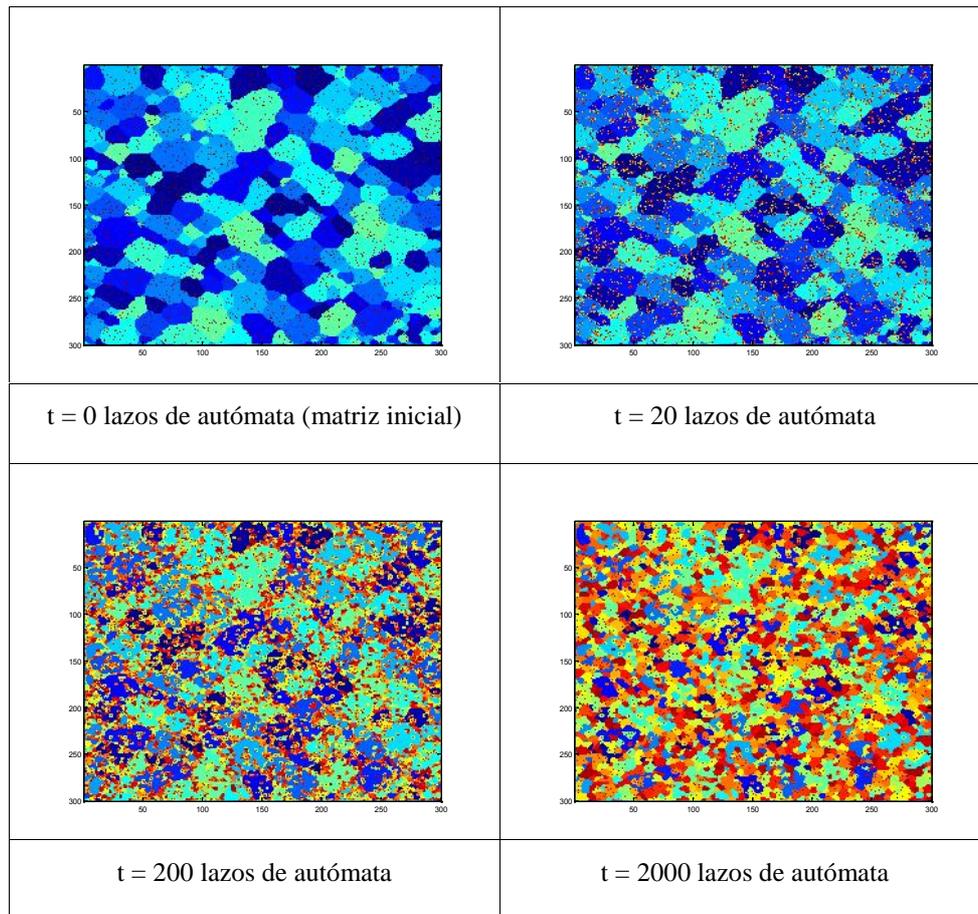


Figura 5. Evolución de la microestructura para el sistema $F_{sf} = 0,04$ y $R_p = 0,4 \mu\text{m}$ a 673K

4 CONCLUSIONES

La evolución de la microestructura con el tiempo mostrada en la figura 5, en la cual se aprecia que la recrystalización se inicia en las partículas de segunda fase, continua en los bordes de grano y finalmente se produce el crecimiento de los nuevos granos recrystalizados está de acuerdo con los resultados reportados experimentalmente.

El comportamiento de la recrystalización con la distribución de partículas de segunda fase observado en la figura 2, indica que para menor distancia media de partículas de segunda fase (λ) más rápida es la recrystalización, resultado que concuerda con la teoría de recrystalización, ya que a medida que λ disminuye aumentan la cantidad de sitios de nucleación para la recrystalización.

Las figuras 3 y 4 muestran que los resultados del algoritmo de simulación presentado se corresponden con la teoría cinética del proceso de recrystalización la cual se describe mediante el modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov

REFERENCIAS

- Burke J.E. and Turnbull D. "Recrystallization and grain growth," Progress in Metal Physics, London: Pergamon Press, 220-292, 1952.
- 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
- Cattaneo, C.A.; Silvetti, S.P. Influencia de la densidad de dislocaciones en la recristalización de materiales. *Mecánica Computacional* Vol XXX: 2819-2830. 2011
- Dimitrov O., Fromageau R. y Dimitrov C. Recrystallization in Metallic Materials. Ed. Haessner. Dr. Riederer-Verlag GMBH, Stuttgart. 137, 1978.
- Humphreys F.J. y Hatherly M. Recrystallization and related Annealing Phenomena. Elsevier, Second Edition. 285-320, 2004.
- Humphreys F.J. y Hatherly M. Recrystallization and related Annealing Phenomena. Elsevier, Second Edition. 232, 2004.