

COMPORTAMIENTO SUPERELÁSTICO EN ALEACIONES DE NIQUEL-TITANIO (NITI): NUCLEACIÓN Y PROPAGACIÓN DE INTERFACES EN UN MODELO TERMOMECAÁNICO 1-D

Hugo Soul^a, Alejandro Yawny^b

^aCONICET, División Física de Metales, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche, Argentina. hugo.soul@gmail.com

^bCNEA-CONICET, División Física de Metales, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche, Argentina. yawny@cab.cnea.gov.ar

Palabras clave: : superelasticidad, propagación y nucleación de interfaces, efectos térmicos, modelo termomecánico.

Resumen. El efecto superelástico exhibido por las aleaciones con memoria de forma bajo ciclado mecánico involucra la ocurrencia de una transformación martensítica reversible. En aleaciones base NiTi policristalinas cargadas uniaxialmente el avance o retroceso de la transformación tiene lugar mediante la nucleación y propagación de interfaces o frentes localizados. En su movimiento, estos frentes intercambian calor latente modificando el campo de temperaturas del material. Teniendo en cuenta este carácter localizado de la transformación y considerando el movimiento de solo una interface, se estudiaron numéricamente los efectos térmicos autoinducidos en función de las condiciones experimentales (velocidades de elongación y ambiente circundante). Asimismo se evaluó la contribución de los mismos a la histéresis mecánica del ciclo superelástico considerando la relación entre tensiones de transformación y temperatura, en el rango de velocidades de 0,1 a 1000 mm/min. Los resultados muestran diferencias cualitativas con datos experimentales para las velocidades grandes de deformación, que podrían explicarse considerando la existencia de un mayor número de frentes de transformación. Se definió entonces, un criterio para las condiciones locales de nucleación de nuevos dominios de transformación. Adaptando el esquema de cálculo a un modelo termomecánico 1-D se simuló ciclos completos. Las curvas tensión-deformación obtenidas reproducen correctamente el comportamiento superelástico tanto en cuasiestáticas como dinámicas de ciclado.

1 INTRODUCCIÓN

El efecto superelástico es uno de los comportamientos particulares exhibidos por las llamadas aleaciones con memoria de forma (AMF) (Otsuka y Wayman, 1998). Por medio del mismo, un material ciclado mecánico desarrolla un comportamiento no-lineal, alcanzando deformaciones inelásticas aunque recuperables durante la descarga. Esto es posible debido a que a una tensión menor que la que produciría deformaciones irreversibles (plasticidad) se induce una transformación martensítica. Durante la re-transformación, o transformación inversa producida en la descarga a menor tensión se recuperan las dimensiones originales con nula o muy poca deformación residual. En probetas cargadas uniaxialmente, las deformaciones al final de la transformación pueden alcanzar hasta un 10%, debido a resultan favorecidas las variantes cristalográficas de martensita que maximizan la elongación en la dirección de la carga (Otsuka and Ren, 2005).

Las aleaciones de NiTi son, dentro de las AMF, la familia que mayor relevancia tecnológica han alcanzado, debido a que permiten grandes deformaciones máximas durante el ciclado superelástico (8-10%), y presentan buenas propiedades de fatiga, corrosión y desgaste. Debido a su biocompatibilidad, uno de los principales nichos de aplicaciones son las prótesis e instrumental quirúrgico (Duerig et al; 1999). En el área de la ingeniería de materiales, civil y de control, interesan las propiedades disipativas asociadas a la histéresis (área encerrada en la curva σ - ε de un ciclo) que resulta del ciclado superelástico (Van Humbeeck, 2003-Ozbulut-2011)

Una de las características particulares que presentan las aleaciones de NiTi bajo ciclado superelástico es la fuerte dependencia de la respuesta mecánica con las condiciones de ciclado (velocidad o frecuencia, temperatura, ambiente circundante). Se observa una dependencia no monótona de la energía disipada con la velocidad, con la existencia de un máximo. Esta dependencia es interpretada, en diferentes trabajos de caracterización (Piedboeuf, 1998 – Heller, 2009 – He, 2010), como consecuencia del acoplamiento entre los efectos térmicos inducidos por el intercambio de calor latente y las tensiones de transformación, que dependen linealmente de la temperatura por medio de una relación del tipo Clausius-Clapeyron. En aleaciones comerciales de NiTi se mide experimentalmente una pendiente $d\sigma/dT$ de 6-7 MPa/K, lo que implica un acoplamiento termomecánico notablemente mayor que en AMF base Cu por ejemplo, donde los valores típicos están entre 1 y 2 MPa/K. Las aplicaciones propuestas prevén desde ciclados pseudoestáticos hasta situaciones dinámicas con frecuencia de algunos Hz, por lo que es necesario incluir el acoplamiento termomecánico en modelos de comportamiento general.

Asimismo, para el planteo del problema térmico es necesario tener en cuenta la cinética de la transformación. En aleaciones de NiTi, este aspecto constituye también una particularidad, y es que el avance y retroceso de la transformación se produce de manera localizada mediante la propagación de interfaces (Messner, 2003). Esta característica es relevante no solo para la definición del problema térmico sino también cuando se estudia la fatiga y la evolución de propiedades con el número de ciclos (Iadicola, 2002 – Soul, 2012).

En este trabajo se describe el desarrollo de un modelo de comportamiento superelástico. El acoplamiento termomecánico es incorporado considerando la propagación de interfaces que actúan como fuentes móviles de calor latente. En primer lugar, se analizan los efectos térmicos de manera desacoplada. A partir de los resultados preliminares se discute la necesidad de contar con un criterio para la nucleación de nuevas interfaces, de manera de que su cantidad y posición queden determinadas por las condiciones del ensayo. Finalmente, se integra el esquema de cálculo térmico con un modelo de comportamiento mecánico y se

exhiben resultados obtenidos para simulaciones bajo diferentes condiciones de ciclado.

2 COMPORTAMIENTO SUPERELÁSTICO ELEMENTAL ADOPTADO

El primer paso para el desarrollo del modelo es la definición del comportamiento mecánico de un volumen uniaxial elemental esquematizado en la Figura 1. Consideramos al volumen compuesto por tramos en fase austenítica y martensítica, con módulos elásticos E_A y E_M respectivamente, conectados en serie. La deformación uniaxial ε , dadas una tensión uniaxial σ y una porción de martensita Z es:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E_A}(1-Z) + Z \frac{\sigma}{E_M} + Z\varepsilon_t \tag{1}$$

o bien, agrupando:

$$\varepsilon = \sigma \left(\frac{E_A Z + E_M (1-Z)}{E_A E_M} \right) + Z\varepsilon_t = \frac{\sigma}{E_{eff}} + Z\varepsilon_t \tag{2}$$

donde E_{eff} corresponde al módulo elástico efectivo del volumen y ε_t es la deformación asociada a la transformación. Así, el primer término constituye la contribución elástica y el segundo la contribución transformacional, que depende solo de la porción de fase. Un incremento de deformación $\Delta\varepsilon$ puede acomodarse elásticamente con un incremento de tensión $\Delta\sigma = \Delta\varepsilon/E_{eff}$ y un incremento de porción de fase $\Delta Z = 0$, a menos que se cumplan alguna de las siguientes reglas cinéticas:

$$\sigma + \Delta\sigma > \sigma_{A-M} \Rightarrow \Delta Z > 0 \tag{3}$$

$$\sigma + \Delta\sigma < \sigma_{M-A} \Rightarrow \Delta Z < 0 \tag{4}$$

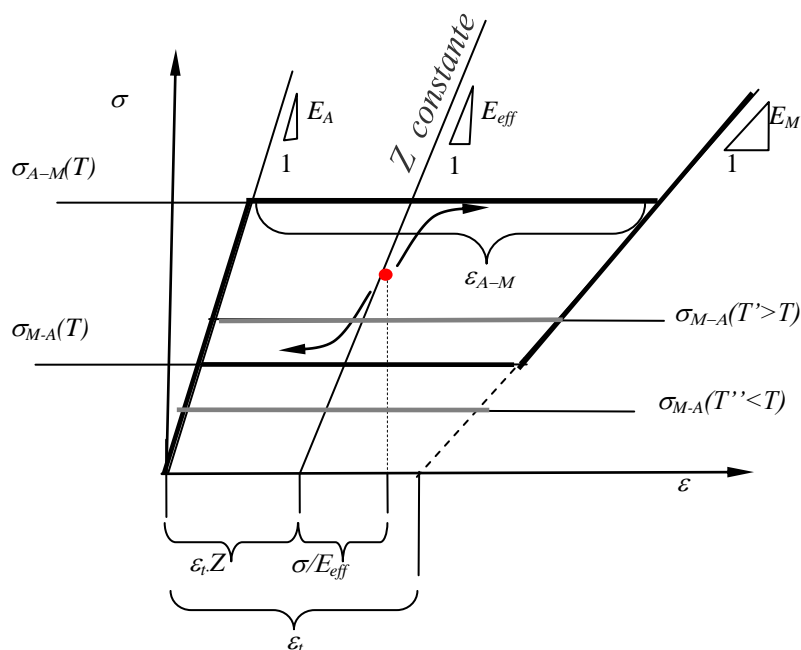


Figura 1 Comportamiento constitutivo superelástico elemental.

Las tensiones de transformación directa e inversa dependen linealmente de la temperatura

del material:

$$\sigma_{A-M} = \sigma_{A-Mref} + \alpha_{cc} \cdot (T - T_{ref}) \quad (5)$$

$$\sigma_{M-A} = \sigma_{M-Aref} + \alpha_{cc} \cdot (T - T_{ref}) \quad (6)$$

donde, α_{cc} es el coeficiente de Clausius-Clapeyron, que para este modelo se considera fijo e idéntico para ambas fases. σ_{A-Mref} y σ_{M-Aref} corresponden a las tensiones evaluadas a la temperatura de referencia T_{ref} . Una consecuencia de que $E_A \neq E_M$, es que la longitud del plateau ε_{A-M} depende de la temperatura, no así la deformación transformacional ε_t .

Las variables σ , ε y Z que definen cada estado son cantidades escalares, por lo que el modelo es cero dimensional. La temperatura T utilizada en las ecuaciones (5) y (6) para actualizar las tensiones de transformación corresponde a la temperatura de la posición adonde se produce la transformación y también es escalar. No obstante, su determinación requiere conocer el campo de temperaturas $T(x)$ que en general es no homogéneo, y la porción de fase local $z(x)$. En la próxima sección, se estudian los cambios en $T(x)$ provocados en un alambre atravesado longitudinalmente por un frente de transformación.

3 EFECTOS TÉRMICOS AUTOINDUCIDOS

3.1 Balance energético

Al estudiar el ciclado superelástico bajo condiciones dinámicas cobran especial interés los efectos térmicos autoinducidos por el intercambio de calor latente de transformación. En esta sección se analizan los cambios de temperatura que ocurren en el material modelado como un dominio unidimensional, atravesado por una interface, actuando como fuente de calor puntual. La tasa de cambio de temperatura, o la energía térmica acumulada en un volumen diferencial como el esquematizado en la Figura 2 resultará del balance entre todas las interacciones consideradas, de acuerdo a la primera ley de la termodinámica:

$$\dot{Q} - \dot{W} = \dot{U} \quad (7)$$

donde Q representa el intercambio neto de calor, W el trabajo realizado y U la energía interna asociada al elemento de volumen. El término de calor, o flujo de energía térmica involucra el calor generado por la transformación y el que se intercambia con el medio exterior (ambiente) y con los elementos contiguos del mismo alambre:

$$\dot{Q} = \dot{Q}_{gen} + \dot{Q}_{in} \quad (8)$$

$$\dot{Q}_{in} = -kA_t \left. \frac{T}{x} \right|_x + kA_t \left. \frac{T}{x} \right|_{x+dx} + h \cdot P \cdot (T_{amb} - T) \cdot dx \quad (9)$$

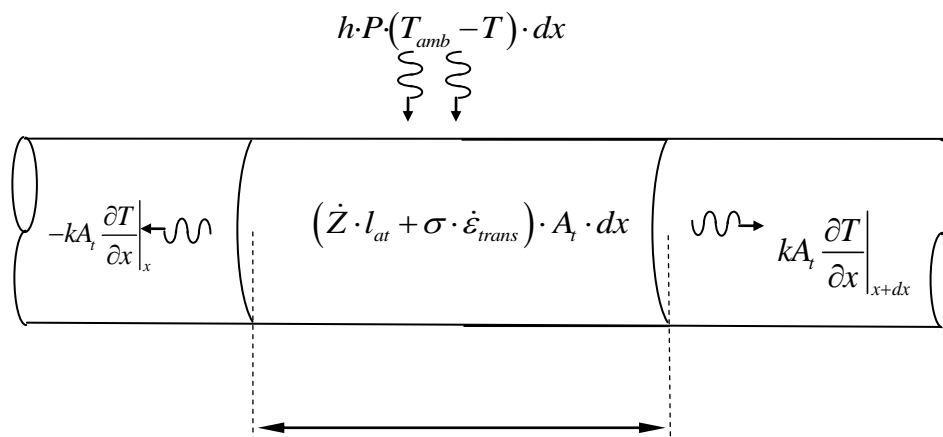


Figura 2 Balance de calor en volumen diferencial

En esta expresión A_t es el área de la sección transversal y P el perímetro. Se consideran aquí el flujo de calor en la dirección axial por conducción a través del mismo alambre (conductividad térmica uniforme k) y el flujo a través de la superficie caracterizado por el coeficiente de transferencia de calor por convección h (no se considera flujo por radiación). Estamos suponiendo que la temperatura es uniforme en cada sección del alambre debido a que el número de Biot es muy pequeño (Incropera, 1996). En efecto, considerando un alambre de diámetro $d = 2,5 \text{ mm}$ y valores $k = 9 \text{ W/mK}$ (la conductividad de la martensita) y $h = 130 \text{ W/m}^2\text{K}$, que corresponde a una convección forzada por la corriente de aire a 5 m/s generada por un ventilador obtenemos:

$$Biot = \frac{h \cdot A_t}{k \cdot P} = \frac{h \cdot d / 4}{k} \ll 0,1 \quad (10)$$

La tasa de calor generado dentro del volumen considerado dependerá de la tasa de variación de la porción de fase local de martensita z . La expresión general para esta contribución puede escribirse entonces como:

$$\dot{Q}_{gen} = \dot{z} \cdot l_{at} \cdot A_t \cdot dx \quad (11)$$

donde l_{at} es el calor latente por unidad de volumen. El trabajo que se considera es el trabajo mecánico que ingresa al sistema debido a la tensión uniaxial aplicada σ y a la deformación uniaxial ε que sufre el volumen, de signo negativo:

$$-\dot{W} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon} \cdot A_t \cdot dx = \sigma \cdot \dot{\varepsilon}_{elas} \cdot A_t \cdot dx + \sigma \cdot \dot{\varepsilon}_{inel} \cdot A_t \cdot dx \quad (12)$$

Los dos términos del último miembro corresponden a las contribuciones elástica e inelástica de la deformación, respectivamente. Como deformación inelástica se considera la correspondiente a la transformación (no hay plasticidad ni dilatación térmica). Puede tomarse, sin introducir errores importantes (Soul, 2011) que la deformación inelástica en un volumen transformado corresponde a ε_{A-M} de la Figura 1 por lo que la expresión para la tasa de trabajo inelástico resultaría:

$$\dot{W}_{inel} = -\sigma \cdot \varepsilon_{A-M} \cdot \dot{z} \cdot A_t \cdot dx \quad (13)$$

La energía interna U se considera constituida por la suma de la energía térmica E_{term} y la energía elástica E_{elas} :

$$\dot{E}_{term} = A_t \cdot dx \cdot \rho \cdot C_e \cdot \dot{z} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (14),$$

$$\dot{E}_{elas} = \sigma \cdot \dot{\varepsilon}_{elas} \cdot A_t \cdot dx \quad (15),$$

donde ρ es la densidad, C_e es el calor específico y E es el módulo elástico actual del material. Entonces, reemplazando todas las expresiones en la ecuación (7) y dividiendo por $\rho C_e A dx$, se llega a la expresión diferencial del balance energético:

$$\frac{k}{\rho C_e} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h}{\rho C_e} \frac{P}{A_t} (T_{amb} - T) + \frac{(l_{at} + \sigma \cdot \varepsilon_{A-M})}{\rho C_e} \dot{Z} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (16)$$

La tasa de trabajo elástico, ecuación (15), equivale al incremento de energía elástica (1er término ecuación (12)) por lo que estos términos se cancelan. Los términos correspondientes a Q_{gen} y a W_{inel} se concentran en un único término como fuente de calor. De hecho, es común referirse a $l_{at} + \sigma \cdot \varepsilon_{A-M}$ como el calor latente para la transformación bajo carga (Isalgue, 2008 - Shaw, 2000). Éste término contiene una contribución química, con poca dependencia con la temperatura y una contribución proveniente del trabajo inelástico, que depende de la temperatura a través de σ .

La velocidad de transformación se debe expresar en función de las variables que controlan la transformación superelástica. En general, los experimentos de caracterización se realizan bajo control de desplazamiento. En estos casos entonces la variable de control es la velocidad de elongación V_{elong} . La conexión con la velocidad de transformación resulta de considerar que la transformación se desarrolla de 0 a 100 % a lo largo del plateau ε_{A-M} . Con estas consideraciones, si se asume el movimiento simultáneo de múltiples interfaces, la velocidad de cada una, suponiendo que todas se mueven a la misma velocidad, equivale a:

$$v = \frac{V_{elong}}{n \cdot \varepsilon_{A-M}} \quad (17),$$

donde n es el número de interfaces. El término fuente de la ecuación (16) se podría expresar entonces como:

$$\frac{(l_{at} + \sigma \cdot \varepsilon_{A-M}) \cdot v \cdot \delta(x - x_{int})}{\rho C_e} \quad (18)$$

Se trata de un término distinto de cero sólo en las posiciones de las interfaces x_{int} . Si en cambio se considera un patrón homogéneo, la relación a establecer es entre la deformación ε y el porcentaje de fase Z , por lo que el término fuente resulta en ese caso:

$$\frac{(l_{at} + \sigma \cdot \varepsilon_{A-M})}{\rho C_e} \dot{Z} = \frac{(l_{at} + \sigma \cdot \varepsilon_{A-M})}{\rho C_e} \frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon_{A-M}} \quad (19)$$

queda claro entonces como, tratándose de un patrón de transformación u otro, los ensayos estarán caracterizados por V_{elong} o por $\dot{\varepsilon}$.

3.2 Implementación numérica

El procedimiento numérico se lleva a cabo discretizando los dominios espaciales y temporales con incrementos finitos Δx y Δt , y se la reemplaza por la ecuación de diferencias:

$$T_i^{m+1} = T_i^m + \left(\frac{k}{\rho C_e} \frac{1}{\Delta x^2} (T_{i+1}^m - 2T_i^m + T_{i-1}^m) + \frac{h}{\rho C_e} \frac{P}{A_i} (T_{amb} - T_i^m) + \frac{(l_{at} + \sigma \mathcal{E}_{A-M})(z_i^{m+1} - z_i^m)}{\rho C_e} \right) \Delta t \quad (20)$$

Obsérvese que esta expresión es válida cualquiera sea la cinética de transformación adoptada. A través de la programación del algoritmo se determinará como varía la porción de fase local z en cada instante m , para cada elemento i . Como condición de borde se fija en T_{amb} la temperatura de los nodos extremos. De aquí en adelante y a menos que se especifique otra cosa, nos referiremos a un alambre de NiTi de longitud $L = 100 \text{ mm}$, diámetro $D = 2,5 \text{ mm}$. Se consideran las siguientes propiedades físicas de la aleación de NiTi superelástico, reportadas en la literatura (Messner, 2003 – Shaw, 2000): conductividad $k=18 \text{ W/m}^2\text{K}$, densidad $\rho = 6450 \text{ Kg/m}^3$, calor específico $C_e = 873 \text{ J/Kg}\cdot\text{K}$ todas asumidas como equivalentes para ambas fases y calor latente de transformación $l_{at} = 10 \cdot 10^7 \text{ J/m}^3$. En lo que respecta a las condiciones de estabilidad numérica en algoritmos explícitos, para los tamaños de incremento de tiempo Δt y de espacio Δx se debe cumplir (Burden, 1998):

$$\frac{k}{\rho C_e} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < 0,5 \quad (21)$$

Por otro lado, pueden tener lugar oscilaciones numéricas si la posición de la fuente relativa a su nodo más cercano varía en cada paso de cálculo. Si la velocidad de la interface v es constante, el problema puede solucionarse adoptando $\Delta t = v/\Delta x$. Otra técnica de “suavización” más general (Lewis, 1979) implica adaptar la discretización espacial en cada paso de cálculo de manera de que la posición de la interface coincida con la de un nodo. Para este estudio se optó por mantener fija la discretización del dominio, y adaptar el incremento de tiempo en cada paso de cálculo, teniendo en cuenta posibles variaciones de la velocidad v .

3.3 Resultados preliminares

Se define la temperatura adimensional θ que corresponde a la variación de temperatura respecto de la temperatura ambiente normalizada por la variación de temperatura asociada a la transformación en condiciones adiabáticas, es decir:

$$\theta = \frac{T - T_{amb}}{l_{at} / \rho C_e} \quad (22)$$

A través de la ecuación (20) se evaluó la evolución del campo de temperatura durante una transformación completa para varios valores de la velocidad V_{elong} y ambientes circundantes, partiendo de la condición inicial $\theta(x) = 0$. En la Figura 3 se resumen los resultados obtenidos.

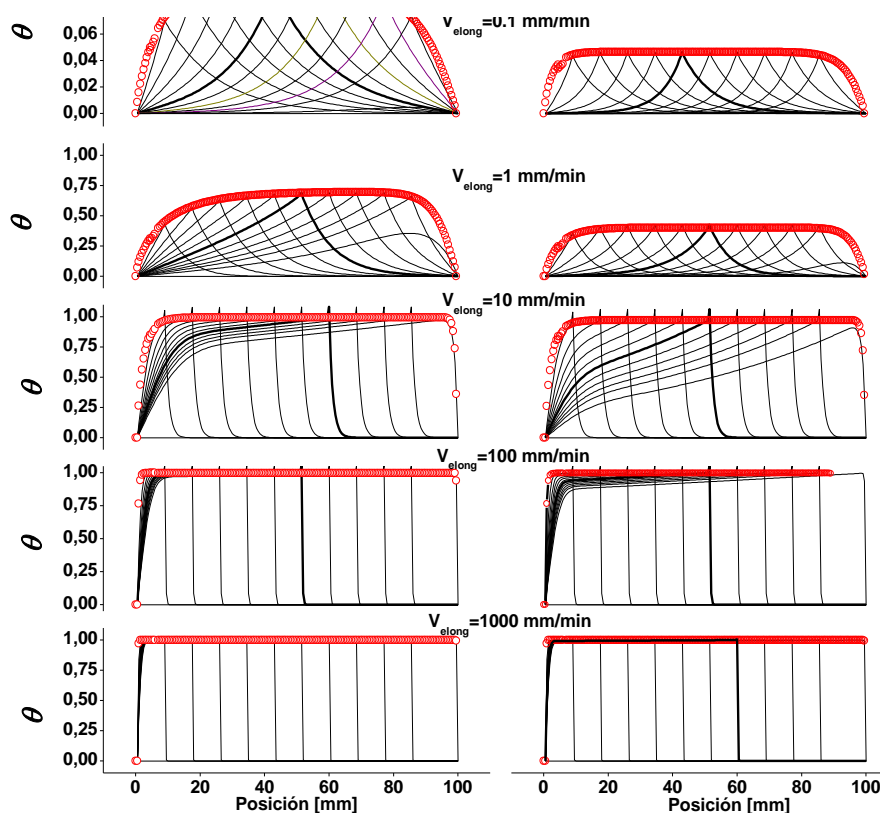


Figura 3. Perfiles de temperatura para distintos instantes: Traza de la temperatura en la interfaz a lo largo de la transformación. Los gráficos de la izquierda corresponden a un valor de $h=14\text{W/m}^2\text{K}$, y los de la derecha a $h=140\text{W/m}^2\text{K}$.

Las columnas corresponden a condiciones de convección natural (izquierda) y forzada (derecha) caracterizadas por coeficientes h de 14 y $140\text{W/m}^2\text{K}$ respectivamente. Para cada situación se incluyen perfiles de temperatura (líneas negras finas) en varios instantes de la transformación. Cada perfil presenta una temperatura máxima correspondiente a la posición de la interface. Esta temperatura alcanza, luego de un transitorio un valor estacionario θ_{est} , cuando se equilibran las tasas de generación y flujo de calor, para luego descender nuevamente al acercarse el final de la transformación. El valor de θ_{est} se incrementa monótonamente con V_{elong} , hasta saturar en 1, que corresponde con la situación adiabática. A bajas velocidades la forma del perfil es aproximadamente simétrica respecto de la interface, y a altas velocidades el perfil se asemeja a un escalón con $\theta = 1$ tras la interface y $\theta = 0$ por delante. Además, mientras que a bajas velocidades se distinguen claramente los períodos transitorios, a altas velocidades la interface alcanza $\theta = 1$ casi instantáneamente. En la Figura 4 se han tomado los valores de θ_{est} en función de V_{elong} para tres coeficientes de disipación h . En cada curva se pueden diferenciar tres zonas. Cuando V_{elong} es suficientemente baja, la temperatura no se ve afectada de manera considerable, lo que se corresponde con un régimen isotérmico. Luego se observa una etapa de transición que se extiende aproximadamente una década en valores de V_{elong} para los tres casos representados. Para valores superiores de V_{elong} se puede considerar que el ciclado ocurre en condiciones adiabáticas. El incremento del valor de h considerado resulta en un desplazamiento de la curva hacia la derecha. Una disminución en el diámetro d desplazaría la curva en el mismo sentido.

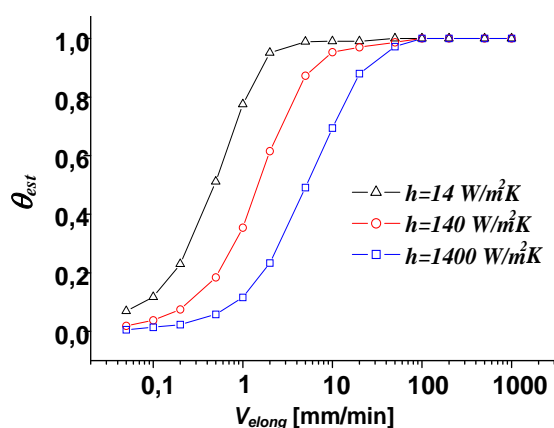


Figura 4. Temperatura estacionaria de la interfaz en función de V_{elong} y del coeficiente de superficie h

El valor de θ_{est} indica cuanto se debe incrementar la tensión respecto de la requerida en condiciones isotérmicas, y se observa que la misma se incrementa monótonamente con V_{elong} atravesando los tres regímenes térmicos. Considerando una dependencia lineal $d\sigma/dT = 6,5$ MPa/K, una interface desplazándose en régimen adiabático ($\theta_{int} = 1$) requiere 115 MPa adicionales respecto a la situación isotérmica. No obstante, para explicar la dependencia no monótona de la histéresis mecánica con la velocidad o frecuencia de ciclado es necesario considerar los ciclo completo, incluyendo la transformación inversa (endotérmica) y también los cambios térmicos asociados al tiempo que transcurre entre el fin de la transformación directa y el principio de la inversa. En efecto, con las simulaciones de ciclos completos se calculó el parámetro I , que da cuentas de la contribución de los efectos térmicos a la histéresis, graficados en la Figura 5.

$$I = \oint \theta_{int} \cdot dZ \quad (23)$$

Los resultados muestran una evolución no monótona de I con V_{elong} , al igual que resultados experimentales reportados en los trabajos mencionados (Piedboeuf, 1998 – Heller, 2009 – He, 2010). No obstante, los valores de $I \approx I$ obtenidos para las velocidades más altas indican una mayor contribución que a velocidades bajas. Esto contrasta con resultados experimentales publicados donde se reporta una curva con un máximo y aproximadamente simétrica (*campana-bell shape*) o incluso una menor histéresis a mayores que a menores velocidades

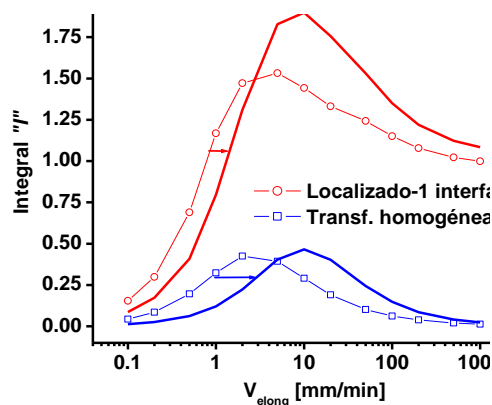


Figura 5. Integral I en función de la velocidad V_{elong} , calculada utilizando un patrón de transformación localizada y uno de transformación homogénea. Las curvas con símbolos corresponden a ciclos evaluados con un coeficiente $h = 14$ W/Km² y las curvas continuas con un $h = 140$ W/Km².

Por otro lado, sí se obtuvieron este tipo de curvas con forma de campana suponiendo que las transformaciones directa e inversa ocurren de manera uniforme, también incluidas en la Figura 5. De estos resultados podría concluirse que para modelar el comportamiento superelástico resulta más adecuado considerar un patrón homogéneo, a pesar de la evidencia experimental de que la transformación es localizada. Para tratar esta aparente contradicción, sin “renunciar” a considerar el carácter localizado, en la próxima sección se discute la posibilidad de que aparezcan nuevos dominios de transformación con sus interfaces adicionales. De acuerdo a la ecuación (17), una mayor cantidad de interfaces móviles reduce la velocidad promedio de las mismas, lo que explicaría, al menos tendencialmente, un descenso en la contribución térmica a la histéresis para altos valores de V_{elong} .

4 NUCLEACIÓN DE NUEVOS DOMINIOS DE TRANSFORMACIÓN

La existencia de múltiples dominios de transformación es un hecho observado experimentalmente. Tanto la nucleación de nuevos frentes como el carácter localizado de la transformación pueden explicarse por un mismo concepto: La tensión uniaxial requerida para que aparezca una inclusión de martensita supera en una cantidad $\Delta\sigma_{nuc}$ a la necesaria para que un frente ya existente propague por allí. Esto se debe al estado particular de tensiones en un entorno de la interface debido al acomodamiento elástico entre las porciones de austenita y martensita. Sin embargo, como vimos en la sección anterior, la tensión uniaxial requerida para la propagación aumenta durante su movimiento, debido al incremento local de la temperatura (vía la relación lineal de Clausius-Clapeyron). Si en algún instante la diferencia de temperaturas entre la interface móvil y una posición mas fría supera a $\Delta\sigma_{nuc}$ estarán dadas las condiciones para que se produzca allí la nucleación de un nuevo frente. La transformación continúa con la propagación de la interface mas fría, hasta que se produce un nuevo evento de nucleación, evidenciado en la curva $\sigma-\varepsilon$ como un descenso abrupto de la tensión. Con fines ilustrativos se incluyó en la Figura 6a un ciclo superelástico realizado a V_{elong} 5 mm/min en el cual se observan 5 eventos de nucleación a lo largo del plateau superior. El valor de $\Delta\sigma_{nuc}$ depende de la geometría de la probeta, de ε_{a-m} y de la diferencia entre los módulos elásticos de las fases. A su vez estos últimos factores están relacionados con la textura cristalográfica. La Figura 6b corresponde a un ciclo realizado para determinar experimentalmente el valor de $\Delta\sigma_{nuc}$. El análisis hasta aquí vale para la nucleación de martensita en un entorno de austenita, pero análogamente, puede asumirse un valor $\Delta\sigma_{nuc}$ negativo para evaluar la posibilidad de nucleación de austenita durante la transformación inversa.

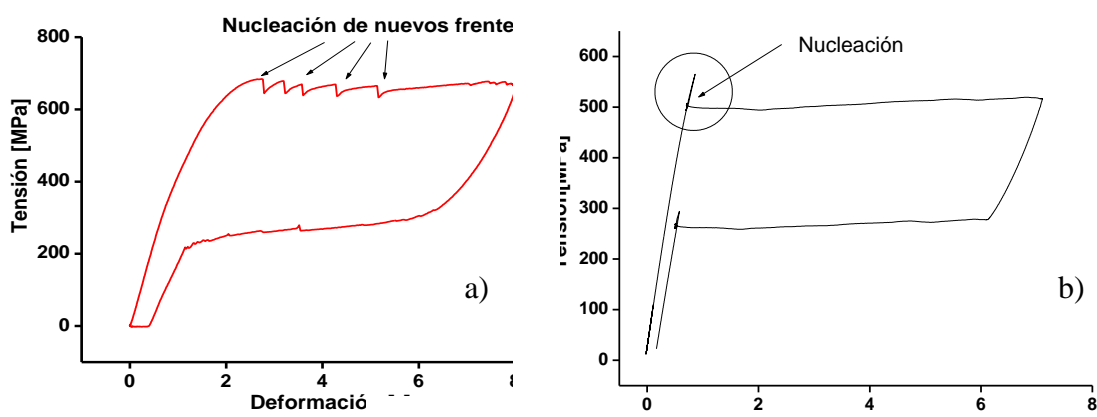


Figura 6 a) Ciclo superelástico realizado a $V_{elong} = 5$ mm/min con alambre de 2,5 mm de diámetro donde se observan varios eventos de nucleación. b) Ciclo superelástico realizado a $V_{elong} = 0,1$ mm/min, sobre una probeta adelgazada en la zona central con la cual es posible observar en condiciones isotérmicas la nucleación de la primera porción de martensita.

5 INTEGRACIÓN DEL MODELO TERMOMECAÁNICO 1-D

5.1 Descripción del ciclo de cálculo

El próximo paso es la integración del comportamiento superelástico con el esquema de cálculo de temperaturas, teniendo en cuenta el criterio para la nucleación de nuevas interfaces. La propuesta consiste en alternar entre el cálculo del estado σ , ε , Z (paso mecánico) y la actualización del campo de fase local $z(x)$ y de temperaturas $T(x)$ (paso térmico). Se mantiene la estructura de predictor elástico - corrector de transformación y el método explícito para el cálculo de la temperatura. En la Figura 7 se han representado en un diagrama de flujo los pasos correspondientes a un ciclo de cálculo completo. En cada paso se incluyen aclaraciones acerca de las variables y ecuaciones involucradas, excepto de los pasos 2 y 6, que por razones de claridad se exponen en el texto a continuación. En el paso 2 se deben definir las tensiones de transformación σ_{A-M} y σ_{M-A} . En primer lugar, se calculan estas tensiones para cada interface i existente mediante las ecuaciones (5) y (6). Luego, se selecciona la interface $i_{propA-M}$ que es la que tiene menor σ_{A-M} asociado, y análogamente la interface $i_{propM-A}$, que será la de mayor σ_{M-A} asociada. $i_{propA-M}$ e $i_{propM-A}$ serán las interfaces que se propaguen en caso de que se evalúe un $\Delta Z \neq 0$ en el paso 4. Antes de saltar al próximo paso, se debe evaluar la posibilidad de que se nucleen nuevos dominios de transformación en alguna posición. Para esto se calculan las tensiones de nucleación de martensita en austenita σ_{nucA-M} en todas las posiciones que están en fase austenítica ($z(x) = 0$), y análogamente se calcula σ_{nucM-A} en los nodos con $z(x) = 1$. Para este cálculo también se utilizan las ecuaciones (5) y (6), incluyendo $\Delta\sigma_{nuc}$ en el segundo miembro, sumando para σ_{nucA-M} y restando para σ_{nucM-A} . Luego, si σ_{nucA-M} es menor que la σ_{A-M} calculada, o si σ_{nucM-A} es mayor que σ_{M-A} , estarán dadas las condiciones para que el próximo incremento de fase ΔZ se produzca mediante la nucleación de un nuevo dominio y no mediante la propagación de uno ya existente.

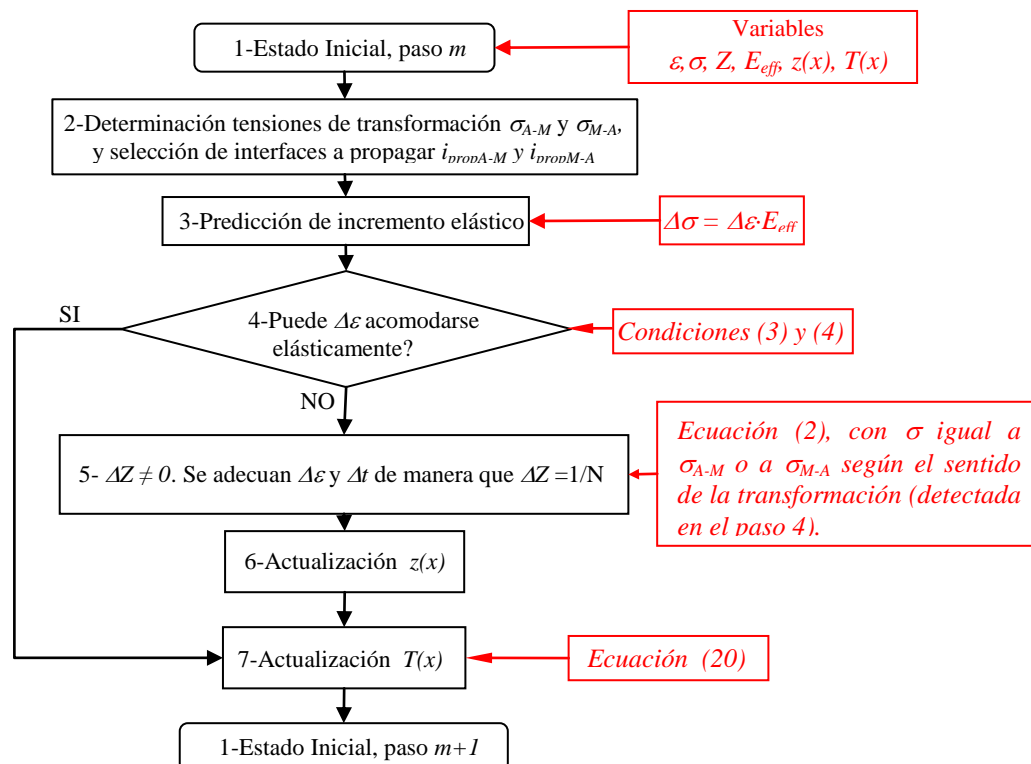


Figura 7. Diagrama de flujo correspondiente a un ciclo de cálculo del modelo termomecánico 1-D

5.2 Simulaciones de ciclos superelásticos unitarios

Inicialmente se estudiaron los eventos de nucleación en función de V_{elong} y para distintas condiciones de ciclado considerando un solo ciclo. Se simularon ciclos superelásticos con una malla de $N=400$ nodos para un alambre de NiTi de largo $L=500$ mm y diámetro $d=2,5$ mm, con una deformación máxima de 0,082. Se supone que el material posee las siguientes propiedades: $E_A=32$ MPa, $E_M=25$ GPa, $\varepsilon_t=0,05$ y unas tensiones de transformación a temperatura ambiente (se toma $T_{amb}=25^\circ$ C) $\sigma_{A-Mref}=500$ MPa y $\sigma_{M-Aref}=100$ MPa. En estas primeras simulaciones se utilizó un coeficiente de transferencia $h=14$ W/m²K con el que se modeló un ambiente circundante de aire en reposo. Inicialmente se introduce una interface en una de las mordazas, debido al estado de tensiones provocado por las mismas. El umbral para la nucleación de nuevas interfaces $\Delta\sigma_{nuc}$ se fijó en 70 MPa. En la Figura 8 se muestra la curva σ - ε obtenida de un ciclo a $V_{elong}=1,5$ mm/min. Se han indicado distintos puntos que indican cómo la respuesta mecánica refleja los distintos eventos de nucleación o colapso de interfaces. Estos eventos se detallan en las Figuras 9a y b con los campos de temperatura y de porción local de fase en función del tiempo. En el instante 1 a los 357 s, aparece el segundo frente. En el punto 2, a los 530 segundos se produce la nucleación de 2 nuevos frentes. Estas 4 interfaces se mueven hasta que en el instante 3 (840 s) se nuclean otras 2 interfaces. Puede observarse en la frontera entre las zonas de martensita y austenita en la Figura 8b, que al aparecer nuevos frentes móviles, la velocidad de los mismos desciende. En el instante 4 a los 1134 s, se produce el colapso de 2 frentes, y en el instante 5 colapsan otros 2 frentes, casi coincidiendo con el fin de deformación. En la curva σ - ε se puede ver que cada evento de nucleación se manifiesta como un descenso de la tensión debido a que la interface nucleada propaga a

menor tensión

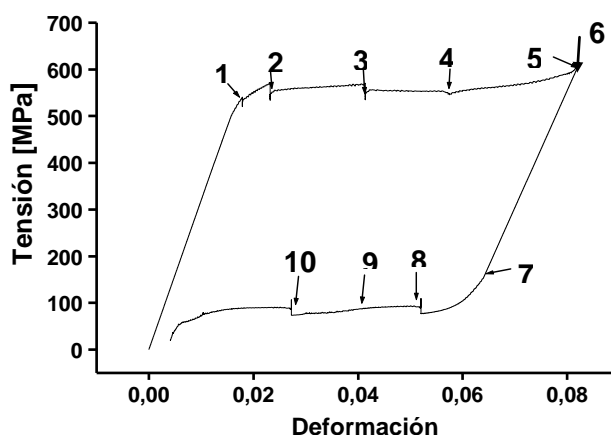


Figura 8. Curva σ - ε obtenida mediante simulación. Las flechas indican los sucesivos eventos de nucleación y colapso de frentes de transformación. $V_{elong} = 1,5 \text{ mm/min}$, $h = 14 \text{ W/m}^2\text{K}$, $L = 500 \text{ mm}$.

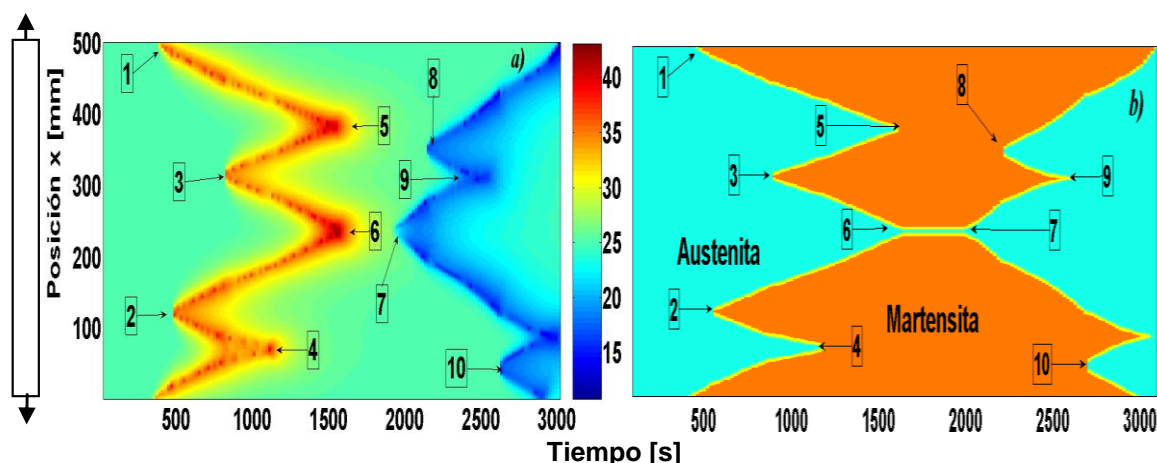


Figura 9. Campos de Temperatura $T(x)$ y de porción local de fase $z(x)$ correspondientes a la simulación del ciclo de la Figura 7, a $V_{elong} = 1,5 \text{ mm/min}$ y $h = 14 \text{ W/m}^2\text{K}$. $L = 500 \text{ mm}$

A partir del instante 4 los frentes interactúan térmicamente y se alcanzan temperaturas de hasta 48°C . Durante la descarga, la retransformación comienza en el instante 7 a los 2000 s, con el movimiento de los 2 frentes que no habían llegado a colapsar. A los 2230 s en el punto 8 se produce la nucleación de un dominio de austenita, con 2 nuevos frentes móviles. A los 2400 s, en el instante 9 se juntan 2 interfaces, registrándose un momentáneo aumento en la velocidad de las interfaces hasta el instante 10 a 2720 s, donde se produce la nucleación de 2 nuevos frentes. Luego hacia el final del ciclo se produce el colapso de las interfaces, en cuyas posiciones la temperatura está por debajo de la temperatura ambiente alcanzando hasta 11°C .

En la Figura 10a se representa la curva σ - ε para $V_{elong} = 100 \text{ mm/min}$, y en la Figura 10b se muestra la evolución del campo de temperaturas con el tiempo correspondiente. En este caso se ve que se producen eventos de nucleación hasta los 13,5 s, y luego la interacción térmica entre los frentes inhibe la posibilidad de otros eventos de nucleación debido al calentamiento por el que se alcanzan hasta 60°C . Luego se simuló 2 ciclos a 1 y 10 mm/min de los que se contaba con las curvas experimentales. Se utilizaron mallas de $N = 200$ nodos, y un valor de

$h=14 \text{ W/m}^2\text{K}$. Las comparaciones respectivas se muestran en las Figuras 11 *a* y *b*. Las curvas σ - ε obtenidas numéricamente reproducen aspectos cualitativos de los ciclos reales, incluido los descensos de tensión asociados a eventos de nucleación, y la inclinación del plateau debido a la evolución de la temperatura en los frentes móviles. Las transiciones entre tramos elásticos y redondeados no se reproducen exactamente en la misma magnitud. Se observa que al finalizar cada ciclo real, existe una deformación permanente, que aumenta con V_{elong} . Sólo a fin de comparar las curvas, se implementó una deformación plástica en los resultados numéricos como un desplazamiento en el origen cuando se alcanza la deformación máxima, entendiendo que de esta manera no se reproduce la dependencia de la misma con V_{elong} . Finalmente se simularon ciclados desde 0,5 a 1000 mm/min , con el fin de evaluar la dependencia de la respuesta mecánica y de la histéresis resultante con la velocidad de elongación.

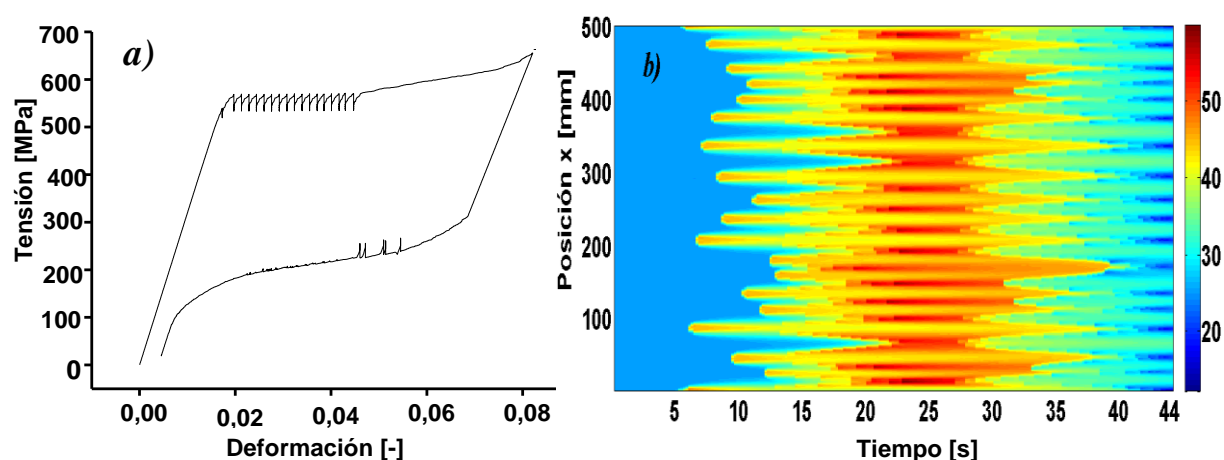


Figura 10. Resultados de simulación de ciclo superelástico: V_{elong} 100 mm/min , $h = 14 \text{ W/m}^2\text{K}$ a) Curva σ - ε , b) Campo de temperatura en función del tiempo.

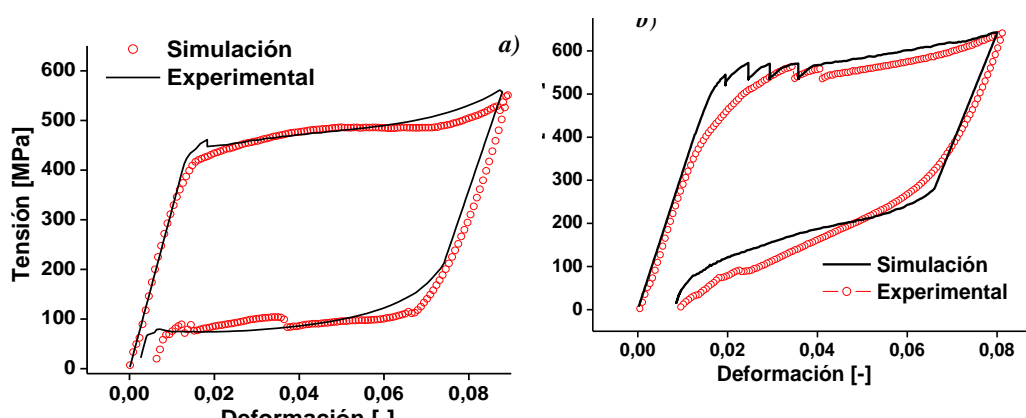


Figura 11. Comparación entre ciclos simulados comparados y ciclos experimentales a) $V_{elong} = 1 \text{ mm/min}$, $L = 91 \text{ mm}$. b) $V_{elong} = 10 \text{ mm/min}$, $L = 75 \text{ mm}$. c) $V_{elong} = 15 \text{ mm/min}$, $L = 94,4 \text{ mm}$. Las simulaciones fueron hechas con un $h = 14 \text{ W/m}^2\text{K}$.

En la Figura 12 se muestran las curvas σ - ε correspondientes al 2^{do} ciclo de cada serie. Se tomó el 2^{do} ciclo de cada serie suponiendo que durante el primer ciclo se suceden todos los eventos de nucleación y luego se mantiene un número de interfaces fija. Puede verse en los resultados, que el ciclo de 1 mm/min envuelve al ciclo de 0,5 mm/min , pero ya, para

10 mm/min se tiene un ciclo con plateaux inclinados alcanzándose tensiones mayores hacia el final de la transformación. El tramo de deformación elástica de la martensita es bien claro en los ciclos a baja velocidad, pero a medida que aumenta V_{elong} , los niveles de tensión para la deformación máxima son mayores, y puede que no se complete el 100 % de la transformación. En la Figura 13 se graficó la energía de histéresis por unidad de volumen en función de V_{elong} para $h=14$ W/m²K y $h=140$ W/m²K. Ahora sí, las curvas presentan la forma de campana, con características similares a las obtenidas para una transformación homogénea en la Figura 5. Esto es consistente con la aparición de gran cantidad de frentes esparcidos por todo el alambre, como sucede para los valores más grandes de V_{elong} .

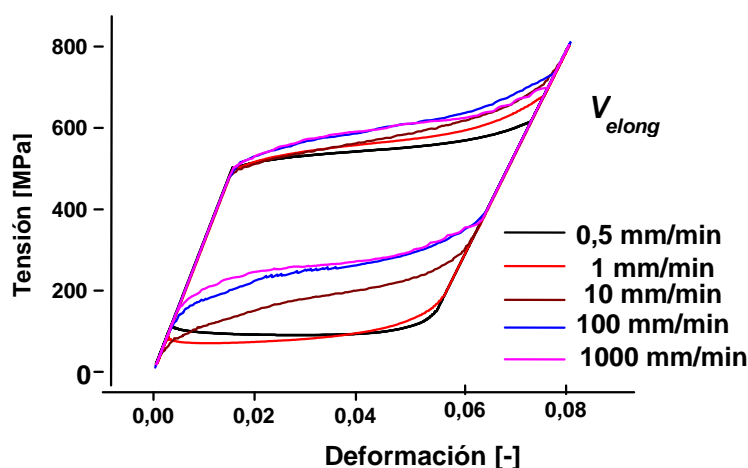


Figura 12. Curvas σ - ε obtenidas con el modelo termomecánico en función de V_{elong} .

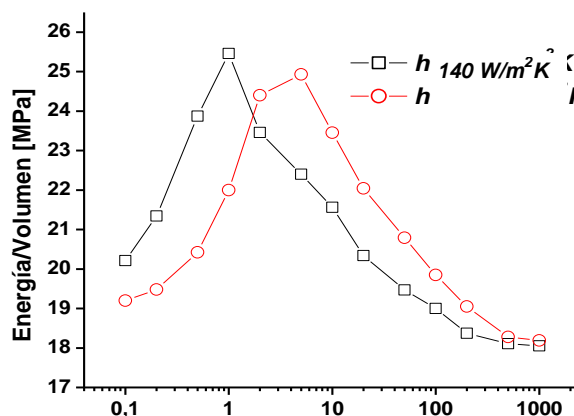


Figura 13. Histéresis mecánica de los ciclos simulados en función de V_{elong} .

6 CONCLUSIONES

A lo largo del trabajo se describieron los pasos mediante los cuales se desarrolló un modelo termomecánico para estudiar el comportamiento superelástico bajo múltiples condiciones de ciclado. Dicho modelo constituye una herramienta numérica útil tanto para estudiar aspectos fenomenológicos de la superelasticidad como para evaluar la respuesta del material en el diseño de aplicaciones. Entre las conclusiones más importantes que se desprenden de lo estudiado en este trabajo se enumeran:

- Mediante la evaluación de los cambios de temperatura autoinducidos evaluados en la sección 3 se demuestra la necesidad de incluir los efectos térmicos y el acoplamiento termomecánico en modelos de comportamiento superelástico.
- Al considerar el carácter localizado de la transformación se reproduce la dependencia no monótona de la histéresis mecánica con la velocidad de ciclado.
- La implementación del modelo termomecánico que integra el esquema de cálculo térmico (sección 3) y el comportamiento superelástico elemental (sección 2) junto con el criterio de nucleación de interfaces (sección 4) permite reproducir los aspectos más importantes del comportamiento superelástico en alambres de NiTi.

REFERENCIAS

- R. Burden, J. Faires; *Análisis Numérico*; 6ta edición; México D.F.; 1998; International Thomson Editors.
- T. Duerig, A. Pelton, D. Stockel; An overview of nitinol medical applications; *Materials Science and Engineering A*; 1999; 273 (175); 149-160.
- Y. He, Y. Yin, R. Zhou, Q. Sun; Ambient effect on damping peak of NiTi shape memory alloy; *Materials Letters*; 64, 1483-1486; 2010.
- L. Heller, P. Sittner, J. Pilch, M. Landa; Factors Controlling Superelastic Damping Capacity of SMAs; *Journal of Materials Engineering and Performance*; 18, 603 - 611; 2009.
- M. Iadicola, J. Shaw; The Effect of Uniaxial Cyclic Deformation on the Evolution of Phase Transformation Fronts in Pseudoelastic NiTi Wire; *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*; 13, 143-155; 2002.
- Incropera, D. DeWitt; *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*; 4^{ta} edición ; John Wiley & Sons; Toronto, 1996
- A. Isalgue, V. Torra, A. Yawny, F. C. Lovey; Metastable Effects On Martensitic Transformation In Sma, Part VI, The Clausius–Clapeyron relationship; *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*; 91,991-998; 2008.
- Lewis E., K. Morgan; *Numerical Methods in Thermal Problems*; 1er edición;1979; Swansea, UK; Redwood Burn Limited.
- C. Messner, E. Werner; Temperature distribution due to localized martensitic transformation in SMA tensile test specimens; *Computational Materials Science*; 26, 95–101; 2003.
- K. Otsuka, C. Wayman; *Shape Memory Materials*; Cambridge University Press; 1998.
- K. Otsuka, X. Ren; Physical Metallurgy of Ti–Ni-based Shape Memory Alloys; *Progress in Materials Science*; 2005; 50, 511–678.
- O.E. Ozbulut, S. Hurlbaas, R. Desroches; Seismic Response Control Using Shape Memory Alloys: A Review; *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 2011; 22; 1531.
- M. C. Piedboeuf and R. Gauvin; Damping Behaviour of shape memory alloys, strain amplitude, frequency and temperature dependence effects; *Journal of sound and vibrations*; 214, 885-901; 1998.
- J. Shaw; Simulations of localized thermo-mechanical behavior in a NiTi shape memory alloy; *International Journal of Plasticity*; 16, 541-562; 2000.
- H. Soul; Aleaciones con memoria de forma: Propiedades mecánica y microestructura. Tesis doctoral, Ciencias de la ingeniería. S.C. Bariloche, Instituto Balseiro, UNCuyo, 2011.
- Soul H, Yawny A; 2012; Superelastic behaviour of NiTi wires under general cycling conditions: Thermomechanic 1-D modeling; *Procedia Materials Science*; 1, 141-148
- J. Van Humbeeck; Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys; *Journal of Alloys and Compounds*; 355, 58-64; 2003.