

Modelado de la recristalización dinámica continua en una aleación de Zn-Cu-Ti laminada

Analia Roatta ^{1,2}, Martín Leonard ^{2,3}, Emanuel Nicoletti ², Fernando Schlosser ⁴ y Javier Signorelli ^{1,2}

¹ Escuela de Formación Básica, Facultad de Cs. Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario (FCEIA-UNR) – Pellegrini 250, Rosario (2000), Santa Fe.

² Instituto de Física Rosario – CONICET/UNR – Ocampo 210 bis, Rosario (2000), Santa Fe.

³ Escuela de Ingeniería Mecánica, Facultad de Cs. Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario (FCEIA-UNR) – Berutti 2109, Rosario (2000), Santa Fe.

⁴ Departamento de Ingeniería, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, Bahía Blanca (B8000CPB), Buenos Aires, Argentina

roatta@ifir-conicet.gov.ar; leonard@ifir-conicet.gov.ar; nicoletti@ifir-conicet.gov.ar; fernando.schlosser@uns.edu.ar; signorelli@ifir-conicet.gov.ar

RESUMEN

El objetivo de este trabajo es la predicción del efecto de la recristalización dinámica continua (CDRX) en la respuesta mecánica de una aleación de Zn-Cu-Ti a temperatura ambiente sometida a ensayos de tracción uniaxial. Para ello se empleará un modelo viscoplástico autoconsistente (VPSC) con linealización afín donde el proceso de fragmentación de granos se asocia al fenómeno de CDRX. Los mecanismos de deformación activos y los fenómenos físicos que participan en la acomodación de la deformación y evolución de la textura cristalográfica de la aleación son: deslizamiento basal, piramidal de 2da especie y prismático, junto con la CDRX. A fin de predecir qué modos potenciales de deformación son activados para esta aleación particular y la influencia del fenómeno de CDRX, se incorpora una ley de endurecimiento basada en densidad de dislocaciones y un modelo de fragmentación por CDRX. El modelo es calibrado y validado frente a un conjunto de datos experimentales que incluyen curvas de fluencia, coeficientes de Lankford y evolución de textura, llevados a cabo sobre una chapa comercial de Zn-Cu-Ti a temperatura ambiente sometida a ensayos de tracción uniaxial en el plano de la chapa, paralela y perpendicularmente a la dirección de laminación del material de partida. Además, se llevará a cabo un estudio paramétrico de la influencia de la movilidad de los bordes de subgrano, tamaño de subgrano y su relación con el tamaño de grano padre, y factor de probabilidad sobre la cinética de CDRX, y se discutirá el consiguiente efecto en el comportamiento plástico de esta aleación.

Palabras Clave: Modelado micromecánico; Chapas de zinc; Recristalización dinámica continua.

1. INTRODUCCIÓN

Los procesos termomecánicos para la manufactura de piezas metálicas involucran, en general, deformaciones plásticas acompañadas de fenómenos microestructurales de recuperación y/o recristalización. En particular la recristalización dinámica (DRX, por sus siglas en inglés) implica la generación de granos nuevos en la microestructura por activación térmica durante la aplicación de la deformación plástica, tanto por mecanismos de nucleación y crecimiento (DDRX) como de fragmentación por formación y rotación de subgranos (CDRX) [1]. El modelado computacional de estos fenómenos resulta de gran interés científico y tecnológico, ya que facilita la comprensión de los aspectos físicos que los gobiernan y a la vez permite optimizar el procesamiento de los materiales y sus propiedades finales.

El zinc (Zn) es un metal de estructura cristalina hexagonal compacta (HCP) y relativamente bajo punto de fusión (419,5 °C), lo que hace que su comportamiento plástico a temperatura ambiente exhiba ciertas particularidades que difieren de las de los metales de estructura cúbica, más comúnmente estudiados. Actualmente existe un gran interés en el desarrollo de aleaciones de base Zn para la fabricación de *stents* y otros implementos médicos reabsorbibles [2]. Complementariamente, las chapas de la aleación Zn-Cu-Ti tienen aplicación en construcción y arquitectura debido a su buen aspecto superficial, resistencia a la corrosión y alta maleabilidad [3]. El afinamiento de grano por adición de aleantes, partículas de segunda fase y/o fragmentación por plasticidad es clave para mejorar la resistencia mecánica y al *creep* de las aleaciones de Zn [2,3]. En trabajos previos, los autores han estudiado la conformabilidad de chapas comerciales de Zn-Cu-Ti tanto experimentalmente como en la posibilidad de su modelado [4–6]. La fragmentación granular por la ocurrencia de CDRX a temperatura ambiente resulta clave para comprender la ductilidad extendida y la estabilidad de la textura encontrada para dichas chapas [4,5]. En general, debido a la estructura cristalina HCP, la marcada textura cristalográfica y la consecuente anisotropía mecánica, los modelos micromecánicos de plasticidad cristalina (CP) resultan óptimos para abordar la simulación de la plasticidad de este material. La incorporación del fenómeno de CDRX en la formulación de los modelos CP es una tarea que ha sido abordada limitadamente en la literatura [1]. Existen antecedentes en el campo de la geología [7], y más recientemente se han propuesto modelos aplicables a la CDRX de aleaciones de Mg [8,9]. El desarrollo de estos modelos es relevante para predecir mejor la evolución de textura y microestructura, y el comportamiento mecánico macroscópico de los materiales HCP y del Zn en particular.

En este trabajo se continúa el abordaje de la simulación de la respuesta mecánica y evolución de textura de chapas de Zn-Cu-Ti mediante el modelo viscoplástico auto-consistente [6] incorporando un submodelo de CDRX basado en la densidad de dislocaciones acumuladas durante la deformación [9,10]. Se presenta resumidamente el enfoque conceptual del modelo, su

posterior implementación y calibración para chapas de Zn-Cu-Ti ensayadas a tracción, y un estudio del efecto de los principales parámetros involucrados. Además, se muestran los resultados en términos de evolución de textura y cinética de la fragmentación por CDRX.

2. ENFOQUE DE MODELIZACIÓN Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1. Modelo VPSC incluyendo CDRX

El modelo empleado en este trabajo está basado en la propuesta de Tam et al. [9] y se implementa en un código de plasticidad cristalina viscoplástico autoconsistente (VPSC [11]) que permite evaluar la respuesta mecánica y el desarrollo de textura cristalográfica del material de interés, en particular para materiales con alta anisotropía. La evolución de las tensiones críticas de activación de los sistemas de deslizamiento responsables del desarrollo de la deformación plástica es descrita por una ley basada en densidad de dislocaciones [10]. Este enfoque permite disponer de variables a nivel de los granos que conforman el policristal para activar o no, los mecanismos de CDRX. Para una descripción más detallada del modelo VPSC puede consultarse la ref. [11] y trabajos previos de aplicación a plasticidad de Zn [5,6]. En la Fig. 1 se muestra el diagrama de flujo del modelo de CDRX incorporado al esquema VPSC, y a continuación se resumen sus aspectos básicos (en la Tabla 1 se identifican los parámetros y constantes incluidas en la formulación).

El inicio de la CDRX se determina con un criterio de densidad crítica de dislocaciones (ρ_{crit}) que desarrolle cada grano padre. Superado este umbral, el grano tiene la posibilidad de generar bordes internos de bajo ángulo que poseen una dada movilidad de borde de grano, M . La generación de estos nuevos subgranos o fragmentos (se usarán indistintamente ambos términos) es condicionada por una probabilidad de ocurrencia dependiente del tamaño del grano padre y del nivel de deformación acumulado. La cinética de la tasa de crecimiento (radio r) de los subgranos recrystalizados se determina mediante la velocidad del borde de grano, V , que se expresa a través de la movilidad M , y una fuerza impulsora, F . Esta fuerza impulsora para el crecimiento del subgrano proviene de la disparidad de las densidades de dislocaciones entre los granos padre y sus subgranos. Los subgranos consumen a los granos padre hasta una fracción que es elegida como parámetro del modelo de acuerdo a la evidencia experimental disponible.

En este trabajo se adopta la posibilidad de un máximo de 9 subgranos recrystalizados por grano padre. La textura inicial se describe con un conjunto de 1000 orientaciones de igual fracción de volumen (representando 1000 granos padre), resultando a lo sumo un total de 10000 orientaciones si todos los granos padre generan el número máximo de fragmentos. Por simplicidad se selecciona una forma esférica para ambos tipos de granos.

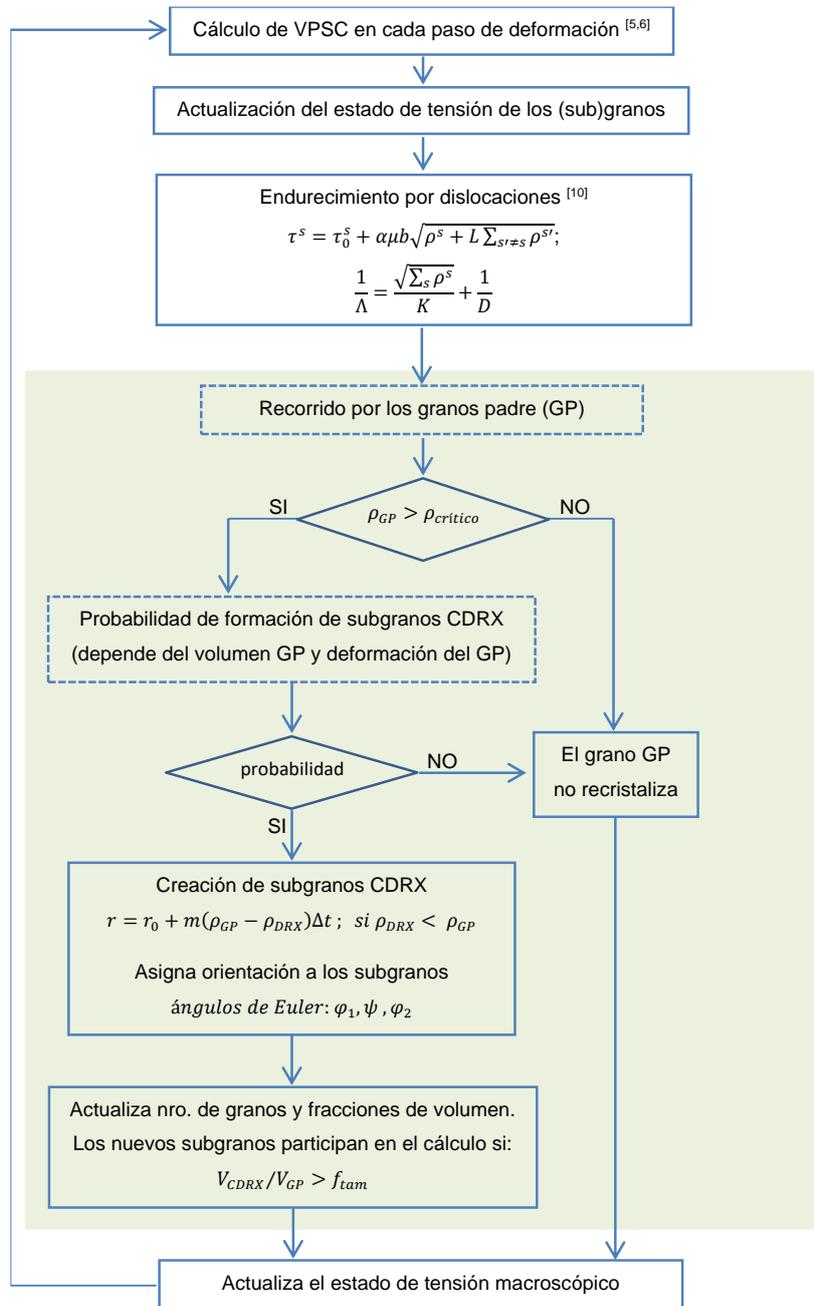


Figura 1: Diagrama de flujo y ecuaciones principales del modelo de CDRX basado en densidad de dislocaciones e incluido en el esquema VPSC.

La implementación de este modelo en el código VPSC se realiza en dos etapas (Fig. 1): en cada paso de deformación impuesto se actualizan el estado de tensiones de cada grano del policristal y se seleccionan los granos que satisfacen los criterios para que ocurra CDRX. En la segunda etapa estos posibles fragmentos actualizan su tamaño y cuando satisfacen un criterio de tamaño mínimo (f_{tam}) comienzan a participar en el cálculo policristalino como granos limpios de

dislocaciones ($\rho = 10^4 \text{ m}^{-2}$) con orientaciones cristalográficas asociadas al modelo de CDRX impuesto. Se asume que los nuevos granos tienen una textura similar a los granos padres debido a la creación de bordes de grano de bajo ángulo que evolucionan hacia alto ángulo con el desarrollo de la deformación [4]. La orientación cristalográfica de los nuevos fragmentos se obtiene modificando la orientación del grano padre con un ángulo aleatorio entre -15° y 15° .

En esta implementación del modelo, se impone que en cada paso de deformación pueda generarse solo un fragmento por grano padre. Si en el transcurso de la deformación se alcanza el máximo de fragmentos y se siguen satisfaciendo las condiciones de CDRX, se elige al azar alguno de los fragmentos ya creados y se los limpia de dislocaciones, con el fin de emular el carácter continuo de este proceso de recrystalización. Una vez modificados el número de granos, sus orientaciones y sus correspondientes fracciones de volumen, se resuelve en forma auto-consistente el nuevo paso de deformación y, al lograr la convergencia, se actualiza el estado de tensiones macroscópicas del material. De este modo, al finalizar el proceso se dispone de la curva de fluencia del material, la actividad de los modos potenciales de deformación, los coeficientes de Lankford y la evolución de la textura cristalográfica.

Tabla 1. Identificación de las constantes y parámetros principales del modelo

Constantes		Valores
b^s	Vector de Burgers (sistema s)	$\langle a \rangle$: 2,66Å $\langle c+a \rangle$: 5,61Å
μ	Módulo de corte	37,9 GPa
Parámetros		Valor adoptado
τ_0^s	Tensión de corte resuelta crítica (del sist. s)	(ver en texto)
Λ	Camino libre medio de dislocaciones	$\Lambda^0 = D_{GP}^0 = 5 \mu\text{m}$
D	Tamaño de grano	
$1/K$	Factor de inmovilización de dislocaciones	0,001
L	Factor de endurecimiento latente	0,5
r_0	Radio inicial de subgranos	0,8–2,0 μm
m	Factor de movilidad borde de subgrano	$3,5\text{--}20 \times 10^{-10} \text{ m}^3/\text{s}$
f_{prob}	Factor de probabilidad	0,1–0,3
f_{tam}	Factor de tamaño (V_{CDRX}/V_{GP})	0–0,05
f_{CDRX}	Fracción fragmentable máxima	0,75

2.2. Material de estudio

El material utilizado para calibrar y validar el modelo es una chapa comercial de la aleación Zn-Cu-Ti de espesor 0,80 mm. Su comportamiento mecánico en tracción uniaxial (UAT) y la evolución de textura y microestructura correspondientes fueron presentados en trabajos previos

[5,6]. A modo de resumen, en la Fig. 2a se presentan las curvas de fluencia (tensión-deformación reales) para tres direcciones de ensayo en el plano de la chapa: a 0°, 45° y 90° de la dirección de laminación (RD, DD y TD, respectivamente). En ellas puede apreciarse la marcada anisotropía mecánica del material debida a la textura cristalográfica heredada del proceso de laminado. Dicha textura inicial y su evolución con la deformación por tracción se resume en la Fig. 2c empleando las figuras de polo basales (eje c ó $\langle 0002 \rangle$). La mayoría de los granos presentan su eje c a $\sim 20^\circ$ de la dirección normal a la chapa (ND) en el plano ND-RD, estando en una orientación marcadamente más favorable para la deformación plástica en el ensayo UAT-RD respecto al UAT-TD. El caso a 45° se encuentra en una condición intermedia. Este efecto se observa principalmente en la anisotropía de las curvas de carga (Fig. 2a) tanto en los valores de tensión como de deformación máxima obtenidas.

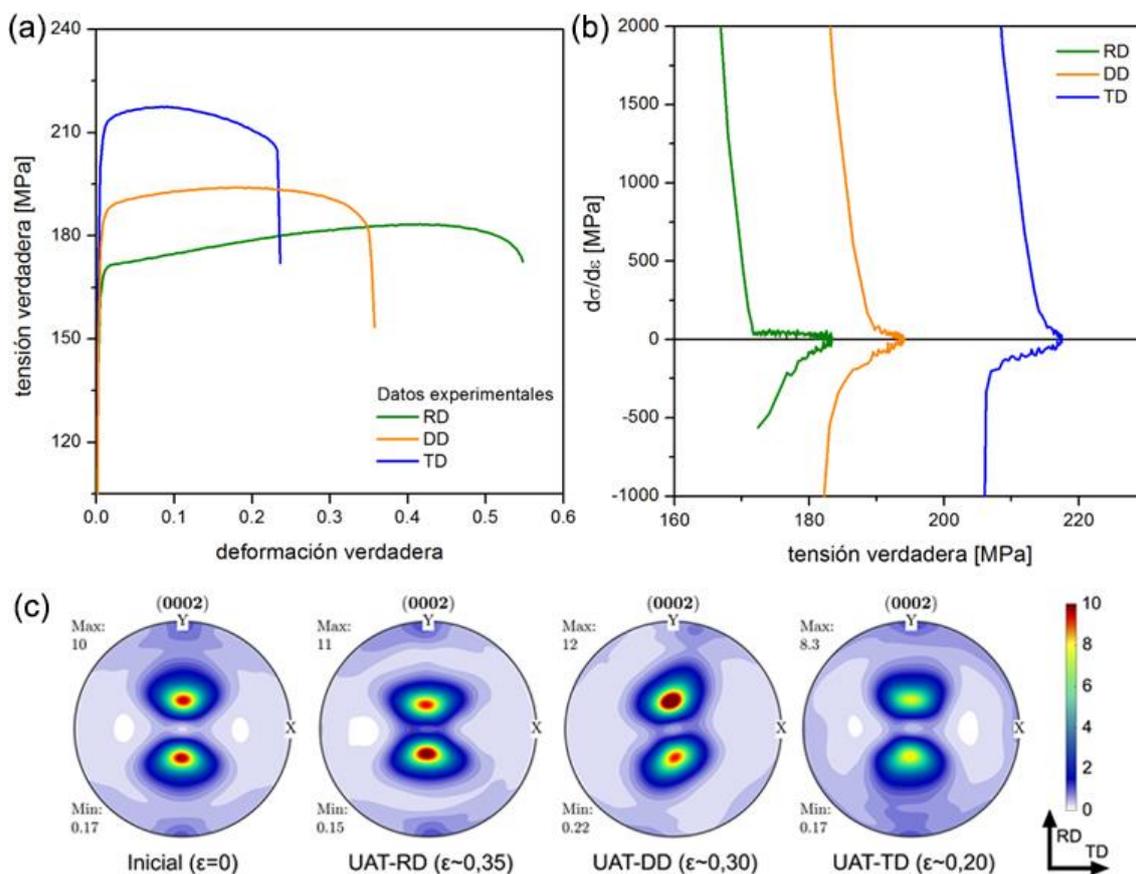


Figura 2: (a) Curvas de fluencia para ensayos de tracción uniaxial (UAT) en tres direcciones; (b) Curvas de endurecimiento por deformación en función de la tensión; (c) texturas experimentales para la condición inicial y luego de los ensayos de tracción.

Con respecto a la microestructura, como se mostró en trabajos previos este material desarrolla CDRX cuando se lo deforma plásticamente a temperatura ambiente, incluso en una sollicitación

sencilla tal como un ensayo UAT en RD [4,6]. En la sollicitación transversal (TD) cabe esperar un afinamiento de grano asistido por maclado, además del proceso de CDRX, aunque su efecto es menor. Como se mencionó, la estabilidad de la textura y su leve aleatorización puede atribuirse al fenómeno de CDRX; como así también la elevada ductilidad en términos de elongación post-uniforme. Otra manifestación de este fenómeno puede observarse en el comportamiento del endurecimiento por deformación. La Fig. 2b muestra la evolución de la tasa de endurecimiento ($d\sigma/d\epsilon$) con la tensión (σ). En el período de deformación plástica homogénea no hay aumento en el endurecimiento, lo que indica que el deslizamiento es el modo de deformación predominante (sin maclado). Este bajo nivel de endurecimiento, seguido de la adopción de valores negativos durante un rango de deformación prolongado, resulta indicativo de fenómenos de DRX [9].

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se comienza calibrando el modelo de endurecimiento por dislocaciones dentro del código VPSC y se logra capturar la anisotropía observada en las tensiones de fluencia del material para ensayos de tracción en distintas direcciones respecto a la de laminación (Fig. 2). Para ello se consideran potencialmente activos los sistemas de deslizamiento basal $\langle a \rangle$, prismático $\langle a \rangle$ y piramidal II $\langle c+a \rangle$ con tensiones críticas CRSS iguales a 12 MPa, 135 MPa y 80 MPa, respectivamente, que cumplen las relaciones típicas empleadas para materiales hexagonales con relación c/a mayor que la ideal [5]. Los valores adoptados para el resto de los parámetros del modelo se detallan en la Tabla 1. Las curvas de carga obtenidas para ensayos en RD y TD se muestran en la Fig. 3a donde puede observarse un marcado endurecimiento del material con la evolución de la deformación cuando no se considera el efecto de la CDRX. Además, en la Fig. 3b se muestran las figuras de polo basales desarrolladas a deformaciones de 0,2 para ambos ensayos. La comparación con las texturas experimentales indica la presencia de componentes cualitativamente correctas para el caso RD aunque con intensidades superiores, mientras que en el caso TD se produce un desdoblamiento de los polos basales que no se observa en las mediciones. Estos efectos fueron observados previamente empleando la ley de endurecimiento de Voce y diferentes linealizaciones, afín y tangente, respectivamente, para la aplicación del código VPSC [5,6]. Respecto a las predicciones de coeficientes de Lankford, la tendencia creciente a medida que la dirección del ensayo se aleja de RD logra reproducirse, aunque los valores obtenidos: 0,13 y 0,48 para UAT-RD y TD, respectivamente, subestiman los experimentales, 0,29 y 0,53, medidos a una deformación de 20% [5].

Con el objetivo de mejorar estos resultados se implementa el submodelo CDRX y se evalúa el efecto de sus diferentes parámetros: movilidad de borde de grano, radio inicial asignado al subgrano, probabilidad de creación de subgranos y umbral de tamaño del subgrano para participar del cálculo autoconsistente.

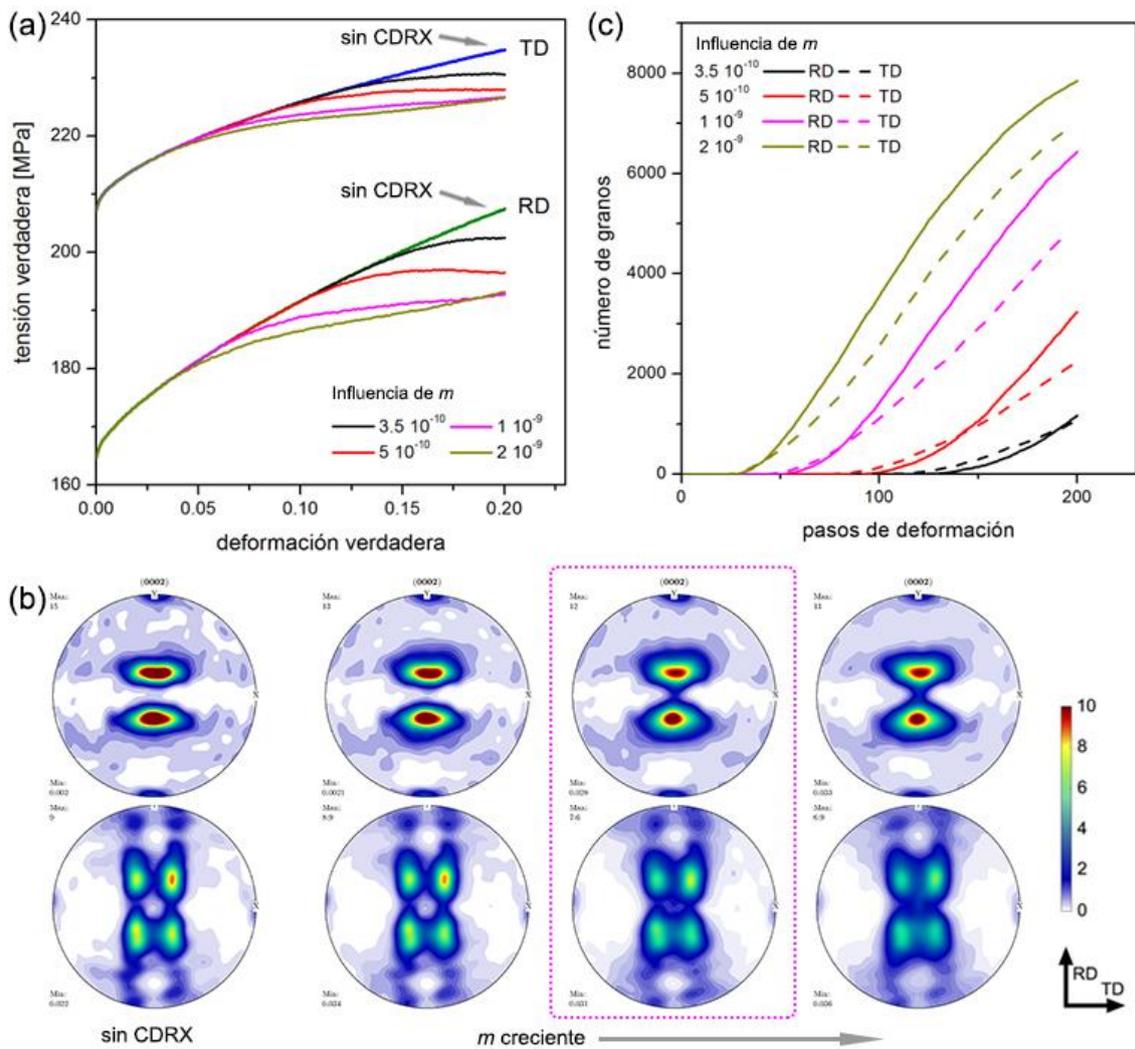


Figura 3: (a) Curvas de fluencia simuladas sin CDRX y con CDRX para distintos valores del factor de movilidad; (b) texturas predichas (fila superior: UAT-RD, fila inferior: UAT-TD); (c) evolución del número de subgranos generados con la deformación.

3.1. Influencia de la movilidad de borde de (sub)grano

La movilidad de borde de grano depende de características del material como son el coeficiente de difusión a través de los bordes de grano, su grosor, la energía de activación para difusión y la temperatura [9]. La cinética de crecimiento de los subgranos está dada por una velocidad $V=MF$, donde F es la fuerza impulsora que proviene de la disparidad entre densidades de dislocaciones del grano padre y el recrystalizado. El factor que acompaña esta expresión (m , ver diagrama en Fig. 1) se eligió entre $3,5 \times 10^{-10}$ y 2×10^{-9} m³/s. Las figuras 3a y 3c muestran las curvas tensión-deformación para los ensayos en RD y TD en comparación con la simulada sin considerar CDRX,

y la evolución del número de nuevos granos con los pasos de deformación (200 pasos corresponde a una deformación de 20%). Puede observarse un ablandamiento más temprano del material a medida que aumenta el factor de movilidad y un posterior endurecimiento cuando la evolución del número de granos tiende a un comportamiento en saturación. Este efecto se observa claramente para la curva correspondiente al mayor m a partir de una deformación de 0,15, siendo más marcado para el ensayo RD.

Con respecto a la evolución de la textura, el cambio principal se da en la disminución de las intensidades al aumentar el número de subgranos recristalizados describiendo mejor los datos experimentales, aunque aún persiste la separación de polos basales para el ensayo en TD. Se indica en magenta el caso de referencia que se tomará de aquí en más para evaluar la influencia del resto de los parámetros estudiados.

3.2. Influencia del radio inicial

En el proceso de generación de nuevos granos es necesario adoptar un tamaño inicial del subgrano recristalizado que luego evolucionará según la cinética de crecimiento seleccionada. Se tomaron valores de r_0 entre 0,8 y 2 μm que corresponden a 0,4 y 0,064% en relación al volumen inicial del grano padre y un factor de movilidad constante $m = 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$.

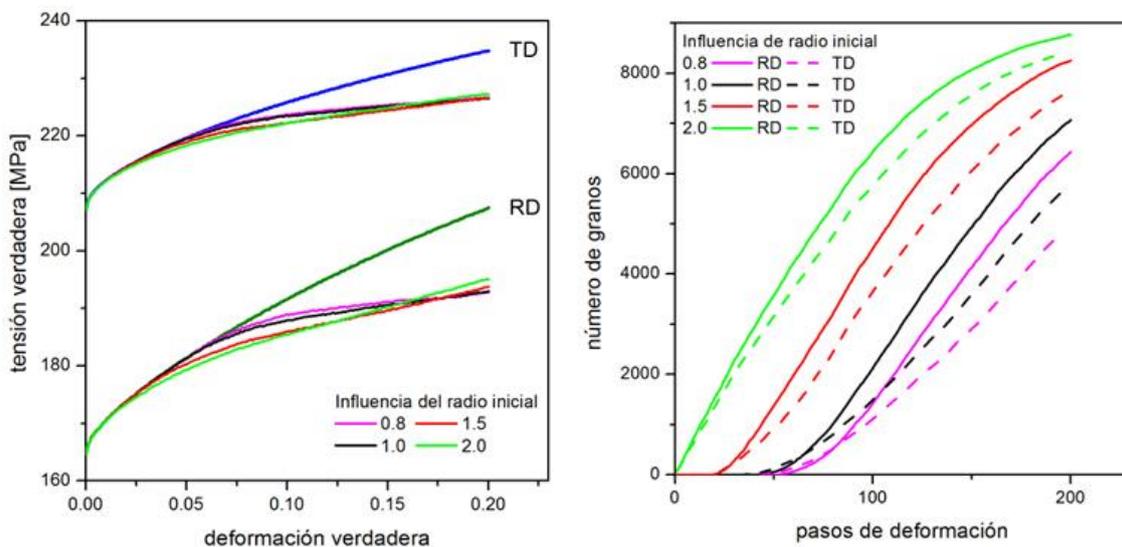


Figura 4: Curvas de fluencia simuladas para distintos valores radio inicial de los subgranos (izq.) y evolución del número de subgranos recristalizados con la deformación (der.).

Valores de r_0 crecientes adelantan el comienzo de la recristalización pero también provocan una saturación temprana del proceso. El primer efecto se manifiesta en las curvas de carga, en un ablandamiento del material (en comparación con la respuesta del modelo sin considerar CDRX)

que comienza a menores deformaciones, mientras que la saturación se traduce en un crecimiento marcado de la pendiente $d\sigma/d\varepsilon$. Este cambio no es representativo del comportamiento del material e indicaría que cesó el proceso de CDRX. Respecto a la evolución de la textura se comporta en forma similar al caso anterior.

3.3. Influencia de la probabilidad de creación de subgranos

La probabilidad de creación de nuevos granos se asume proporcional al tamaño del grano padre y de su deformación en ese paso de modo de activar el proceso si supera un valor elegido al azar. Se analiza la influencia del factor de proporcionalidad entre 0,1 y 0,3. Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 5 donde puede observarse que el inicio del ablandamiento no se modifica en el rango estudiado y que la aparición de saturación en las curvas de evolución de número de granos DRX vuelve a manifestarse en un endurecimiento indeseado del material.

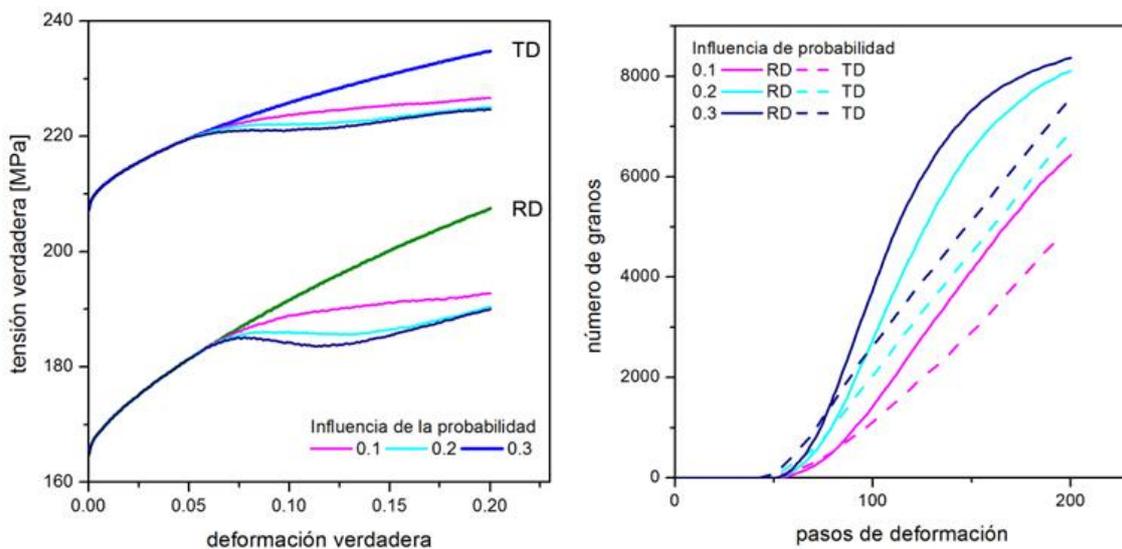


Figura 5: Curvas de fluencia simuladas (izq.) y evolución del número de subgranos recristalizados con la deformación (der.) para distintos valores del factor de probabilidad (f_{prob}).

3.4. Influencia del umbral de tamaño del subgrano

El umbral de tamaño de grano es la fracción de volumen del subgrano respecto a su grano padre a partir de la cual el nuevo grano participa en el cálculo autoconsistente. La Fig. 6 muestra las respuestas tensión-deformación y evolución de nro. de granos para umbrales decrecientes a partir del 5%. Los umbrales menos restrictivos llevan a un comienzo más temprano de la CDRX como también la saturación, tal como se vio en la sección 3.2. Aunque no son mostradas, la evolución de textura sigue un comportamiento similar a los casos previos.

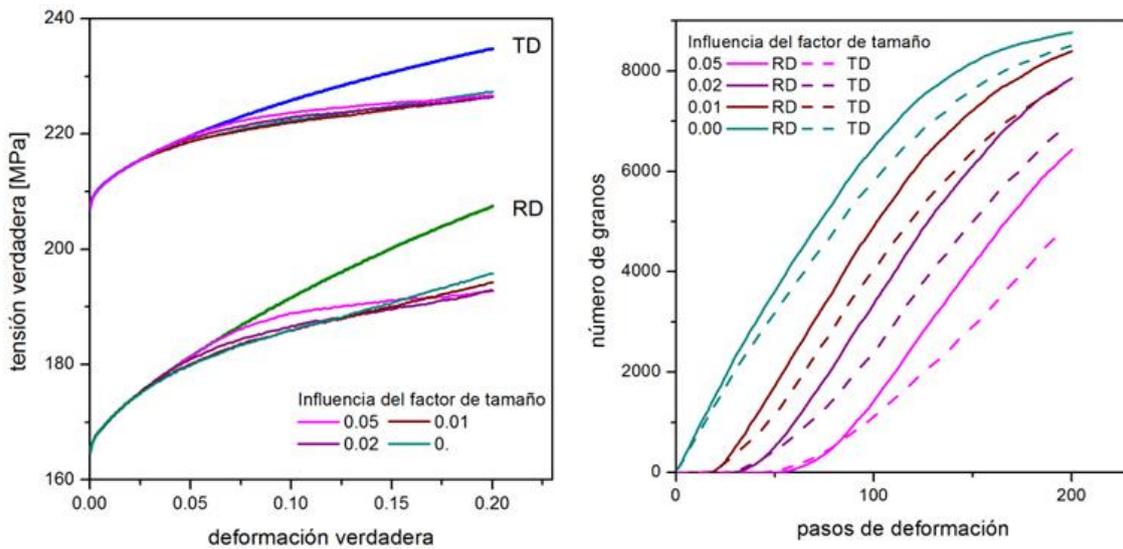


Figura 6: Curvas de fluencia simuladas (izq.) y evolución del número de subgranos recristalizados con la deformación (der.) para distintos valores del factor de tamaño (f_{tam}).

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se implementó un modelo de CDRX basado en la densidad de dislocaciones incluido en el esquema VPSC a fin de simular el efecto de dicho fenómeno de recristalización en el comportamiento mecánico de una chapa de Zn-Cu-Ti. La ley de endurecimiento por densidad de dislocaciones implementada logra capturar la anisotropía de la respuesta en tracción uniaxial en distintas direcciones respecto a la de laminación de la chapa y brinda información a nivel de cada grano padre, necesaria para determinar el inicio del proceso de CDRX. Se analizó la influencia de varios parámetros del submodelo de CDRX y se logró modificar el comportamiento de las curvas tensión-deformación encontrando una marcada disminución de la tasa de endurecimiento del material, compatible con la evidencia experimental. Respecto a la evolución de la textura, en todos los casos analizados se desarrollaron las mismas componentes principales con una disminución de las intensidades al tener en cuenta la CDRX, aproximándose a las intensidades medidas.

La obtención de datos experimentales referentes a la evolución microestructural durante la CDRX, complementarios a los disponibles hasta ahora (por ejemplo, mapeo EBSD *ex situ* mediante ensayos secuenciales con seguimiento de la microestructura en regiones representativas) brindarían información más detallada sobre fracción de volumen de material recristalizado, dependencia con la orientación del grano padre, reorientación de nuevos fragmentos (ángulo y eje de misorientación), posibilidad de fragmentación por maclado, etc.

Estas tareas, que permitirán la calibración/validación del modelo presentado, se están abordando en trabajos en curso.

REFERENCIAS

- [1] Huang, K. y Logé, R. *A review on dynamic recrystallization phenomena in metallic materials*. Materials and Design, 111: 548–574. 2016.
- [2] Mostaed, E., Sikora-Jasinska, M., Drelich, J. y Vedani M. *Zinc-based alloys for degradable vascular stent applications*. Acta Biomaterialia, 71: 1–23. 2018.
- [3] Porter, F. *Zinc Handbook*. 1st ed. CRC Press, Nueva York. 1991.
- [4] Leonard, M., Moussa, C., Roatta, A., Seret, A. y Signorelli, J.W. *Continuous dynamic recrystallization in a Zn–Cu–Ti sheet subjected to bilinear tensile strain*. Materials Science and Engineering A, 789. 2020.
- [5] Roatta, A., Leonard, M., Nicoletti, E. y Signorelli, J.W. *Modeling texture evolution during monotonic loading of Zn-Cu-Ti alloy sheet using the VPSC polycrystal model*. Journal of Alloys and Compounds, 860: 158425. 2020.
- [6] Leonard, M., Nicoletti, E., Roatta, A. y Signorelli, J.W. *Recristalización dinámica continua en una chapa de Zn-Cu-Ti: caracterización experimental y modelado*. VII CAIM / II CAIFE (ISSN 2683-8818), 15-17 sept. 2021, UTN Fac. Reg. San Nicolás.
- [7] Signorelli, J. y Tommasi, A. *Modeling the effect of subgrain rotation recrystallization on the evolution of olivine crystal preferred orientations in simple shear*. Earth and Planetary Science Letters, 430: 356–366. 2015.
- [8] Zhou, G., Z. Li, D. Li, Y. Peng, H. Wang and P. Wu. *Misorientation development in continuous dynamic recrystallization of AZ31B alloy sheet and polycrystal plasticity simulation*. Materials Science and Engineering A, 730: 438–456. 2018.
- [9] Tam, K.J., M.W. Vaughan, L. Shen, M. Knezevic, I. Karaman and G. Proust. *Modelling the temperature and texture effects on the deformation mechanisms of magnesium alloy AZ31*. International Journal of Mechanical Sciences, 182: 105727. 2020.
- [10] Kitayama, K., C.N. Tomé, E.F. Rauch, J.J. Gracio and F. Barlat. *A crystallographic dislocation model for describing hardening of polycrystals during strain path changes*. International Journal of Plasticity, 46: 54–692. 2013.
- [11] Lebensohn R. y Tomé C. *A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals*. Acta Metallurgica & Materialia, 41(9). 1994.