

# RiUPTC

Repositorio Institucional  
UPTC

[repositorio.uptc@uptc.edu.co](mailto:repositorio.uptc@uptc.edu.co)

# ANÁLISIS POR ESTRÉS RESIDUAL DE LA ALEACION Ti6Al4V UTILIZADA EN IMPLANTES ORTOPÉDICOS

Leydi Julieta Cardenas Flechas<sup>a</sup>, Estrella Natali Borja Goyeneche<sup>b</sup> Jersson Xavier Leon Medina<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Ingeniera Electromecánica, Joven Investigadora, Grupo de Energía y Nuevas Tecnologías- Gente, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia. Maestría en Ingeniería Mecánica. Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá,

ljcardenasf@unal.edu.co

<sup>b</sup> Ingeniera Aeronáutica, Grupo de Investigación AFIS - Análisis de Falla, Integridad y Superficies. Maestría en Materiales y Procesos Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá, enborjag@unal.edu.co

<sup>c</sup> Ingeniero Electromecánico, Grupo de Investigación y Desarrollo de Ingeniería en Nuevas Tecnologías- GIDINT, Universidad Santo Tomás- Tunja. Doctorado en Ingeniería Mecánica y Mecatrónica Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá, jxleonm@unal.edu.co.

**Resumen**— El Titanio es uno de los elementos más abundantes de la tierra, posee características especiales que lo hace fundamental en diversos campos, su estructura electrónica le permite formar soluciones sólidas con algunos elementos para generar mejores efectos en los procesos involucrados, dos elementos de aporte que generan excelentes resultados son el aluminio y el vanadio, esto gracias al adecuado balance entre la resistencia a la corrosión, sus propiedades mecánicas y su buen comportamiento a temperaturas elevadas, obteniendo la aleación de Ti-6Al-4V, este artículo pretende dar a conocer las características más relevantes de este compuesto, el estudio de su composición por difracción de rayos X, y su comportamiento de estrés residual para análisis de textura, estableciendo características propias del material así como las ventajas y mejoras que influyen de manera directa en el desempeño, vida útil y biocompatibilidad del elemento en un conjunto como aleación. Para el análisis se utiliza el método Rietveld que permite ajustar los parámetros seleccionados en un proceso iterativo definido para encontrar la condición de convergencia más óptima con los valores de las intensidades experimentales y el modelo teórico, obteniendo resultados coherentes de acuerdo con el rango de los parámetros, realizando análisis unidireccional y multidireccional en diversos ángulos.

**Palabras clave**—Análisis de estrés residual, DXR, Ti-6Al-4V.

**Abstract**— Titanium is one of the most abundant elements of the earth, has special characteristics that make it fundamental in various fields, its electronic structure allows it to form solid solutions with some elements to generate better effects in the processes involved, two elements of contribution that generate Excellent results are the aluminum and the vanadium, this thanks to the adequate balance between the resistance to the corrosion, its mechanical properties and its good behavior at elevated temperatures, obtaining the alloy of Ti-6Al-4V, this article pretends to reveal the characteristics More relevant of this compound, the study of its composition by X-ray diffraction, and its residual stress behavior for texture analysis, establishing characteristics of the material as well as the advantages and improvements that directly influence the performance, useful life And biocompatibility of the element in a set as an alloy. For the analysis the Rietveld method is used to adjust the selected parameters in an iterative process defined to find the most optimal convergence condition with the values of the experimental intensities and the theoretical model, obtaining coherent results according to the range of the parameters, Performing unidirectional and multidirectional analysis at different angles.

**Keywords**— residual stress analysis, XRD, Ti-6Al-4V.

## INTRODUCCIÓN

La aleación de Ti- 6Al- 4V es una excelente combinación de elementos gracias a sus propiedades mecánicas y físicas, esta aleación es ampliamente utilizada en materiales y aplicaciones como la aeroespacial, energética, automovilística, industria de implantes médicos y dentales.

El Ti-6Al-4V se descubrió en 1954 a través de la adición de 6% de aluminio para estabilizar la fase alfa y 4% de vanadio para estabilizar la fase beta [1].

La aleación Ti-6Al-4V es un tipo de material avanzado con baja densidad, alta dureza específica, excelente resistencia a la corrosión, buena soldabilidad y rendimiento a altas temperaturas, y ha dado respuesta a la necesidad de compatibilidad en implantes para el cuerpo

La aleación Ti6Al4V presenta diferentes tipos de microestructuras tales como laminar, equiaxial y martensítica. Además, los elementos aleantes como el caso del aluminio tiende a estabilizar la fase  $\alpha$  e incrementa la temperatura de transformación de  $\alpha$  a  $\beta$ , mientras que el vanadio estabiliza la fase  $\beta$ , bajando la temperatura de transformación de  $\alpha$  a  $\beta$ . [2]

La microestructura fase  $\alpha$  tiene una microestructura monofásica, que promueve una buena soldabilidad y resistencia a la oxidación.

En el desarrollo de este trabajo se analiza la aleación Ti6Al4V en estado sólido – polvo, por difracción de rayos X, y análisis de estrés residual unidireccional y multidireccional, teniendo en cuenta características propias del material como aleación.

## MATERIALES Y MÉTODOS

### A. Caracterización de componentes

Los parámetros típicos de red para la fase  $\alpha$  de la aleación Ti6Al4V son  $a=2.925 \text{ \AA}$ ,  $c=4.67 \text{ \AA}$ , estos parámetros pueden variar dependiendo de la composición de la fase  $\alpha$ ; para el caso de la fase  $\beta$  el parámetro de red es  $a=3,19 \text{ \AA}$ . En la Fig. 1 se indica la estructura de cristalina del titanio, aluminio y vanadio.

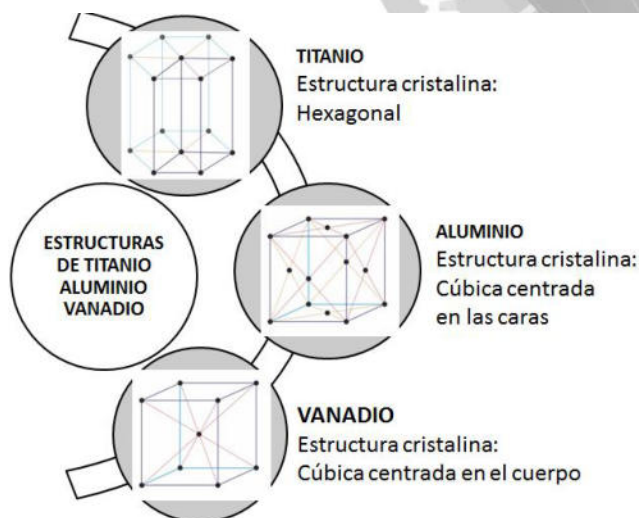


Fig. 1. Estructura de la aleación Ti-6Al-4V. Fuente: Autores del proyecto

Para el desarrollo de este trabajo fue necesario conseguir piezas de la aleación Ti-6Al-4V, para ello se realizó el contacto con la empresa OrtoMec, quien suministró el material de forma gratuita, con objeto de investigación.

La aleación fue cortada por hilo obteniendo probetas de espesor de 3 mm y radio 12mm. Así mismo, para obtener una muestra en polvo fue necesario realizar un desbaste superficial, como se observa en la Fig. 2.



Fig. 2. Izq. Muestra en polvo. Der. Muestra sólida de aleación Ti-6Al-4V. Fuente: Autores del proyecto

La muestra fue analizada por medio de Difracción de Rayos X con el equipo X'pert Pro de la marca Panalytical, que se encuentra ubicado en el edificio 405 de la Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, con una configuración especial para el análisis de estrés residual.

### B. Método de difracción de rayos X

El método de Difracción de Rayos X tiene diversas aplicaciones en varias áreas del conocimiento, sin embargo, su objetivo principal es la caracterización de materiales debido a que siempre se tienen muchas preguntas analíticas relacionadas con la constitución cristalina de muestras materiales.

La difracción de rayos X es la única técnica de laboratorio que revela información estructural, como composición química, estructura cristalina, tamaño de cristalito, orientación preferencial y grosor de capa. Por lo tanto, el método de difracción es ampliamente usado para analizar una gran variedad de materiales, desde polvos, películas delgadas hasta nanomateriales y objetos sólidos como es el caso del presente artículo.



Max Von Laue, en 1912, descubrió que las sustancias cristalinas actúan como rejillas tridimensionales de difracción para las longitudes de onda de rayos X similares a la separación de los planos en una red cristalina. La difracción de rayos X se basa en la interferencia constructiva de rayos X monocromáticos y una muestra cristalina.

La interacción de los rayos incidentes con la muestra produce interferencia constructiva (y un rayo difractado) cuando las condiciones satisfacen la Ley de Bragg ( $n\lambda = 2d \sin\theta$ ).

La ley de Bragg relaciona la longitud de onda de la radiación electromagnética con el ángulo de difracción y la distancia entre celdas en una muestra cristalina. Los rayos difractados son detectados, procesados y contados. Mediante el escaneo de la muestra a través de un intervalo de  $2\theta$  ángulos, todas las posibles direcciones de difracción de la red deben ser alcanzadas debido a la orientación aleatoria del material en polvo.



Fig. 3. Equipo de difracción de Rayos X. Fuente: Universidad Nacional de Colombia

### C. Método Rietveld

El método Rietveld permite ajustar teóricamente las tensiones de red, deslizamientos atómicos, parámetros estructurales, anisotropía que dependen de las condiciones de experimentación al perfil completo del difractograma en polvo suponiendo que el difractograma es la suma de un número de reflexiones de Bragg centradas en sus posiciones angulares respectivas.

Luego los parámetros escogidos van siendo ajustados en un proceso iterativo hasta que se alcanza una condición de convergencia con los valores de las intensidades experimentales y el modelo teórico. En la determinación de la estructura cristalina el método de Rietveld juega un papel importante debido a su capacidad de determinar con mayor precisión los parámetros cristalinos de la muestra.

## DESARROLLO DEL TRABAJO

Teniendo en cuenta las características de la aleación, el análisis principal que se realiza se basa en el estudio de estrés residual, ejecutado por medio de X'pert Stress. Se obtuvieron dos difractogramas mediante el equipo de difracción de rayos X, los cuales se muestran a continuación en las Figs. 4. y 5.

Para el estudio de estos resultados se utilizó el análisis por el método Rietveld de refinamiento, obteniendo porcentajes de componentes atómicos y moleculares de la aleación.

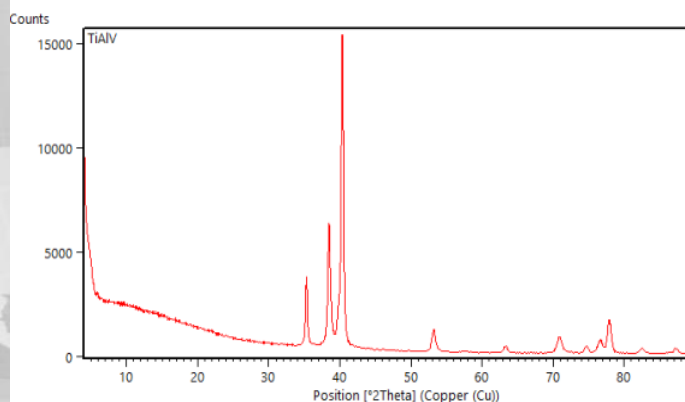


Fig. 4. Difractograma muestra sólida. Fuente: Los autores

En la Fig. 5 se muestra el resultado DRX para la muestra en polvo, se observa al inicio del difractograma una disminución la línea  $2\theta$ , que puede ser considerada como la parte amorfa de la aleación, de acuerdo con el resultado y el análisis de picos, coincide con el elemento Titanio y Aluminio, se deduce que la pequeña porción de Vanadio no se reconoce puesto que corresponde a un 4% del total de la aleación.

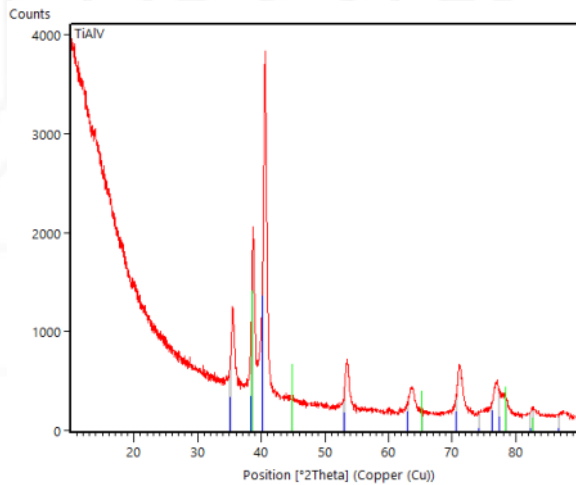


Fig. 5. Diffractograma muestra en polvo. Fuente: Los autores

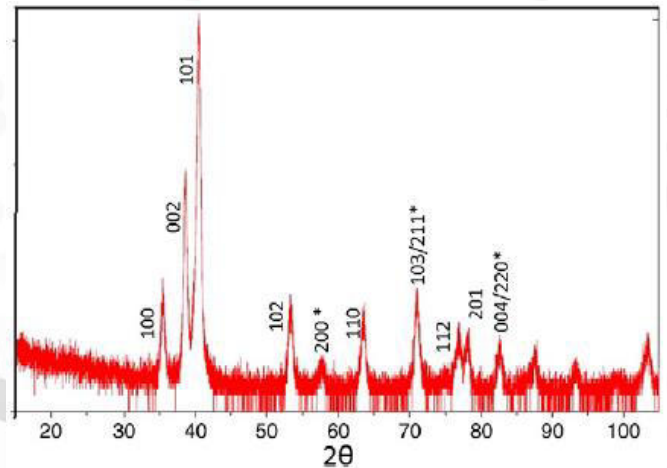


Fig. 6. Diffractograma de la aleación Ti-Al6-V4. Fuente [5]

La tabla 1 muestra la posición de los picos de las muestras en polvo y sólida obtenidas por DRX, el análisis nos permite establecer que los puntos son similares en referencia con el patrón de la figura 6 que es el diffractograma resultado de la investigación en el año 2011 de la aleación Ti-6Al-4V [3].

Tabla 1. Picos obtenidos con las muestras sólida y en polvo

No.	Posición [2θ] Muestra en polvo	Posición [2θ] Muestra sólida
1	35,4866	35,3312
2	38,7257	38,4623
3	40,6036	40,3433
4	53,5042	53,2136
5	63,6481	63,4513
6	71,1204	70,8137
7	76,9731	74,6484
8	78,3196	77,8854
9	82,7559	82,4101
10	87,6218	87,259

Fuente: Autores

En la Fig. 6 se muestra un diffractograma obtenido por Safdar y Wei, dónde se observa la coincidencia en la mayoría de picos en referencia con los diffractogramas obtenidos de las muestras en polvo y sólida.

## RESULTADOS

El análisis de estrés se desarrolló a partir del software provisto por la Universidad Nacional de Colombia- sede Bogotá. El programa permite analizar medidas clásicas de estrés o tensión {hkl}. En la Fig. 7 se observa el resultado del escaneo desarrollado por el equipo de difracción de rayos X con función de análisis de estrés.

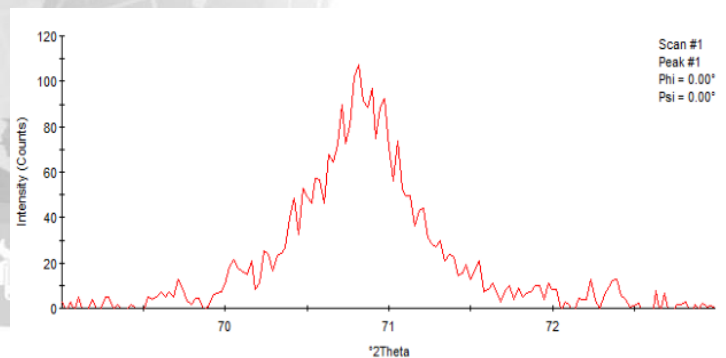


Fig. 7. Resultado de la medición de la muestra sólida de Ti6Al4V.

En este caso se utilizó la ficha para el Titanio del database del software, dada la composición de la aleación en pequeños porcentajes de Aluminio y Vanadio, así mismo se realizó análisis unidireccional y multidireccional de estrés residual.

Tabla 2. Parámetros de análisis para la muestra.

PARAMETERS	
Method	Unidirectional stress analysis
Material	Ti (Ti)
s <sub>1</sub>	-3.00 1/TPa
1/2 s <sub>2</sub>	11.32 1/TPa
Wavelength for calc.	KAlpha 1+2
Strain-free d-spacing	1.33344 Å
Stran-free sin <sup>2</sup> (Psi)	0.400
Shear stress	No

Fuente: Autores

Para el análisis unidireccional de estrés solo se examina una dirección phi (una serie de mediciones sin<sup>2</sup> ψ, posiblemente extendida con valores girados de 180°) y sólo calcula valores para la tensión normal medida σφ y la tensión de cizalla medida τφ (es decir, en la dirección de inclinación de la medición). El estado de estrés en sí no se determina dentro de este análisis de esfuerzo unidireccional.

Las mediciones tomadas en materiales multifásicos generalmente analizan las variaciones elásticas en una sola fase. La deformación medida se convierte en una combinación de la tensión macroscópica y las tensiones incurridas debido a otras fases que dan lugar a una tensión calculada que es una media de sólo la fase analizada, no el material a granel. En tabla 3 se muestra el resultado del análisis de la muestra sólida para los 3 ángulos Phi (0, 60 y 120) con el material de referencia Titanio.

Tabla 3. Resultado del análisis unidireccional de estrés para la aleación de Ti-Al-V.

Phi (*)	SigmaPhi (MPa)	StdDev (MPa)	Sig11+Sig22 (MPa)	StdDev (MPa)
0.00	688.6	182.5	1038.5	7.7
60.00	390.7	200.5	986.9	8.5
120.00	863.1	452.6	961.5	19.1

Fuente: Autores

Para un ángulo phi de 120 la muestra tiene una tensión normal de 863.1 MPa, el cual es el valor mayor respecto a los ángulos 0 y 60. Para esta muestra no existe un valor de tensión de corte por eso no se muestra en la tabla de resultados 3. La tercera casilla Sigma 11 y Sigma 12 es la suma de esfuerzos la cual obtiene el mayor valor a un ángulo de cero.

A continuación, en las Figs. 8, 9 y 10 se muestran los cálculos de estrés para la aleación en los diferentes ángulos medidos 0, 60 y 120 respectivamente. En la línea de fondo se muestran los intervalos de d calculados, libres de deformación y el ángulo de rotación φ.

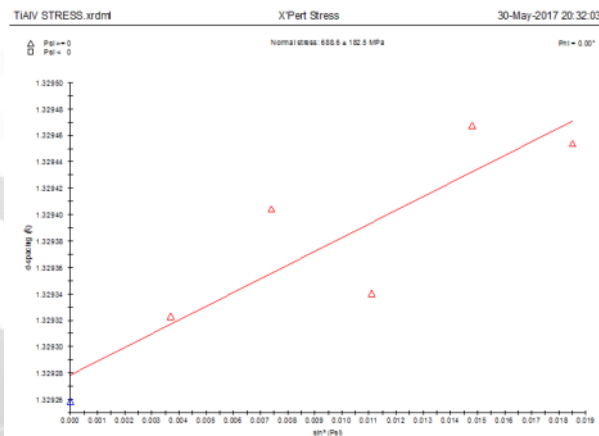


Fig. 8. Pendiente de resultado para ángulo Phi 0°.

El análisis de tensión multidireccional combina múltiples series de mediciones sin<sup>2</sup> ψ (por ejemplo, 0°, 45° y 90° giradas, cada una posiblemente extendida con valores girados de 180°). A partir de los valores de σφ y τφ (para 0°, 45° y 90°) se puede analizar el estado de tensión para calcular las tensiones medidas σ<sub>11</sub>, σ<sub>12</sub> y σ<sub>22</sub> y / o las tensiones principales σ'<sub>11</sub> y σ'<sub>22</sub>. Para el análisis de las tensiones principales se debe encontrar un ángulo de giro adicional φ que indique la orientación del tensor de tensión principal.

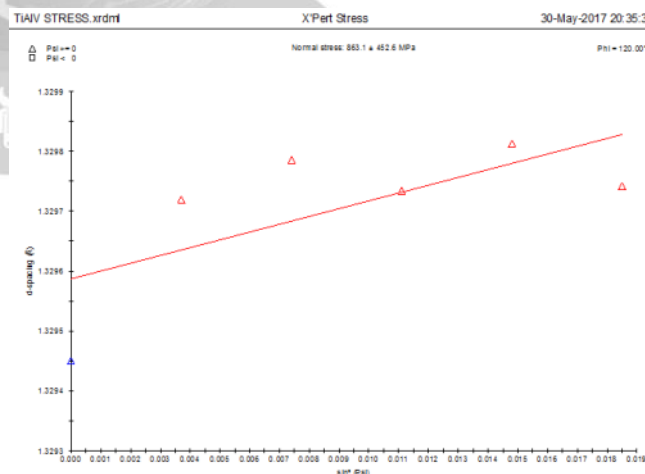


Fig. 9. Pendiente de resultado para el ángulo Phi 60°. Fuente: Autores

VIGILADA MINEDUCACIÓN



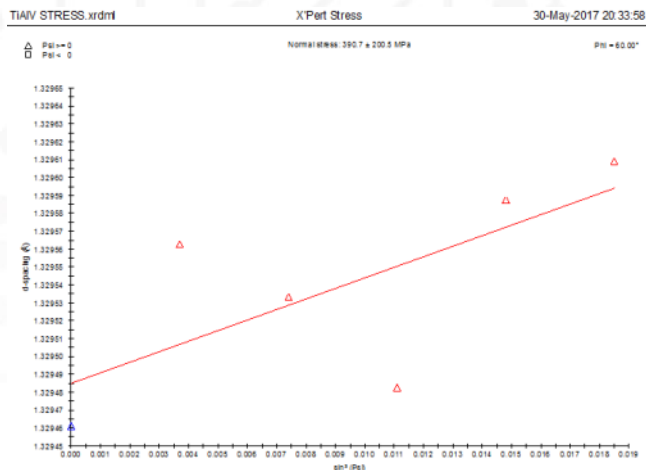


Fig. 10. Pendiente de resultado para el ángulo Phi 120°. Fuente: Autores

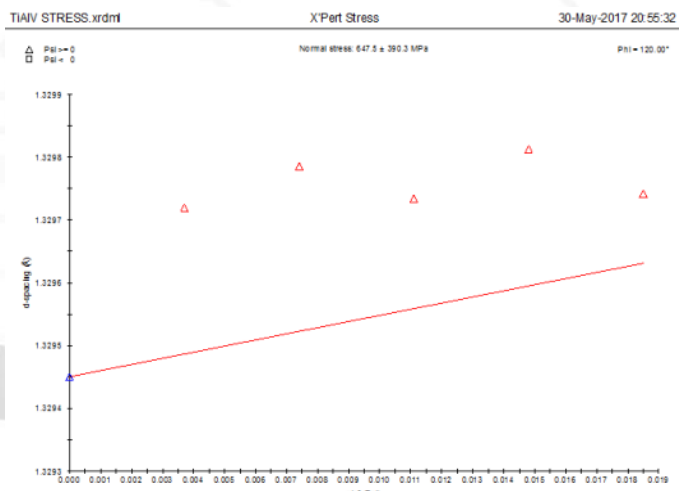


Fig. 12. Espacios d versus el ángulo de rotación 120°. Fuente: Autores

La Fig. 11 de resultados de tensiones muestra los valores de la tensión normal medida  $\sigma_\phi$  (SigmaPhi), la tensión de corte medida  $\tau_\phi$  (TauPhi), la suma de esfuerzos Sigma11 + Sigma22 y adicionalmente el tensor  $\sigma_{ij}$  (MPa) y las tensiones principales  $\sigma'_{ij}$  (MPa).

Stresses in the specimen reference frame

$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 647.5 & 0 & 0 \\ 0 & 647.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\Delta\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 390.29 & 0 & 0 \\ 0 & 390.29 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
---	---

Rotation angle Phi: 0°

Stresses in the principal reference frame

$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 647.5 & 0 & 0 \\ 0 & 647.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\text{Deviatoric Tensor} = \begin{pmatrix} 647.5 & 0 & 0 \\ 0 & 647.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\text{Hydrostatic Tensor} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
---	--	---

$\Delta\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 390.29 & 0 & 0 \\ 0 & 390.29 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$= \begin{pmatrix} 390.29 & 0 & 0 \\ 0 & 390.29 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
---	---

Trace(Sigma) = 995.6 ± 16.48 MPa

Weighted R-value: 3.82 %

Fig. 11. Resultados análisis multidireccional. Fuente: Autores

Adicional a esto se puede observar el resultado del estrés tensor que es de 647.5 MPa, y un delta de tensiones principales de 390.29 MPa. Es decir que en cuadro principal o de referencia el estrés es mucho más alto que la desviación estándar de las tensiones o esfuerzos medios tomados estadísticamente de los resultados de los picos de la muestra inicial (Fig. 7).

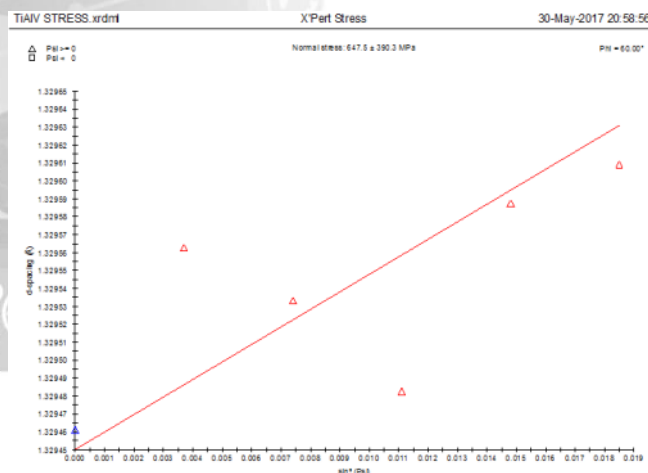


Fig. 13. Espacios d versus el ángulo de rotación 60°. Fuente: Autores

Al igual que el análisis unidireccional, el multidireccional calcula los espacios d versus el  $\sin^2$  libres de deformación y el ángulo de rotación  $\phi$ , los cuales se pueden observar en las Figs. 12, 13 y 14.

VIGILADA MINEDUCACIÓN

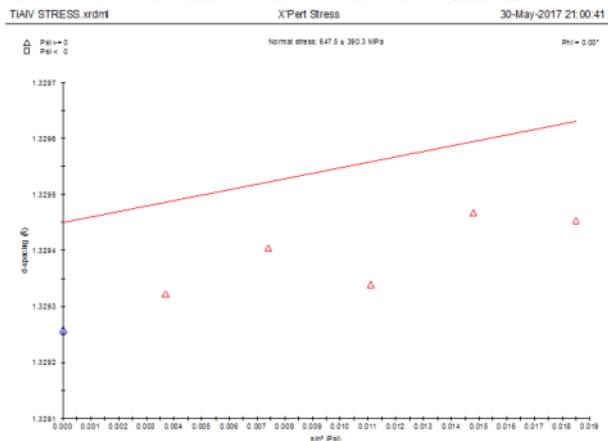


Fig. 14. Espacios d versus ángulo de rotación 0°. Fuente: Autores

## CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados obtenidos por Safdar y Wei en el año 2011, los picos obtenidos con el análisis por difracción de rayos X realizado coinciden en un 95% en referencia con su posición  $2\theta$ .

El análisis cuantitativo de fases realizado a través del método Rietveld se ha convertido en una excelente forma de caracterización de diversas aleaciones o mezclas con un alto grado de complejidad y muy buenos resultados como los obtenidos para Ti-6Al-4V.

En el estudio de estrés de la aleación Ti-6Al-4V, las medidas repetidas de diferentes ángulos permiten comprobar la existencia de un gradiente de estrés visualizado en los resultados de las gráficas.

De acuerdo con el cambio de parámetros iniciales se hace un cálculo instantáneo para determinar el mejor análisis en relación con las tensiones residuales obtenidas, ya sea por medio de la técnica clásica unidireccional o multidireccional.

El grado de estrés puede variar en diversas aleaciones y componentes puesto que éste puede acumularse durante la vida útil de los mismos y causar un fallo repentino, tener certeza de esta característica garantiza la durabilidad del material, la eficiencia y seguridad para tener el control de la tensión residual.

En análisis de estrés residual, la difracción de rayos X permite identificar los cambios en el espaciado reticular cristalino de un material que induce las tensiones residuales, así sea en cambios menores.

El análisis de estrés residual a través del software X'pert Stress permite ser más eficiente en cuanto a cálculos manuales para obtener estos mismos resultados en un menor tiempo posible y con un grado de exactitud alto.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá por los equipos y programas suministrados y al Profesor David Landinez por su apoyo en el trabajo desarrollado.

## REFERENCIAS

- [1] Campanelli, S. L., Contuzzi, N., Ludovico, A. D., Caiazzo, F., Cardaropoli, F., & Sergi, V. (2014). Manufacturing and characterization of Ti6Al4V lattice components manufactured by selective laser melting. *Materials*, 7(6), 4803–4822. <https://doi.org/10.3390/ma7064803>.
- [2] Cely, M. (2013). Efecto de la Modificación Superficial de la aleación Ti6Al4V en condición de contacto lubricado con polietileno de ultra alto peso molecular (UHMWPE), 1–132.
- [3] Li, J. P., Li, S. H., Van Blitterswijk, C. A., & de Groot, K. (2005). A novel porous Ti6Al4V: Characterization and cell attachment. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 73A(2), 223–233. <https://doi.org/10.1002/jbm.a.30278>.
- [4] Long, M., & Rack, H. J. (1998). Titanium alloys in total joint replacement--a materials science perspective. *Biomaterials*, 19(18), 1621–1639. [https://doi.org/10.1016/S0142-9612\(97\)00146-4](https://doi.org/10.1016/S0142-9612(97)00146-4).
- [5] Parthé, E. (1970). Elements of x-ray crystallography. *Materials Science and Engineering*, 6(4), 279. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(70\)90057-1](https://doi.org/10.1016/0025-5416(70)90057-1).



[6] Safdar, A., Wei, L. Y., Snis, A., & Lai, Z. (2012). Evaluation of microstructural development in electron beam melted Ti-6Al-4V. *Materials Characterization*, 65(D1d), 8–15.  
<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2011.12.008>.

[7] Xu, P. Q. (2012). Microstructure characterization of Ti-6Al-4V titanium laser weld and its deformation. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China (English Edition)*, 22(9), 2118–2123.  
[https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(11\)61437-4](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(11)61437-4).

[8] Casagrande, S. P., & Blanco, R. C. (2004). Método de Rietveld para el estudio de estructuras cristalinas, 2(1), 1–5.

