

MODELO DE AJUSTE CURVAS DE CRECIMIENTO DE GRANO EN SISTEMAS MONOFASICOS Y BIFASICOS

Carlos. A. Cattaneo^a, Manuel A. Ledesma^a, Silvia P. Silvetti^{b,c}

^a *Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Universidad Nacional de Santiago del Estero, Santiago del Estero, Argentina*

^b *Facultad de Matemática Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina*

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

Palabras clave: Crecimiento de grano, Partículas de segunda fase, Simulación.

Resumen. Muchas propiedades de los materiales dependen del tamaño de grano de la microestructura. Así, mientras los materiales estructurales requieren que la microestructura posea un tamaño de grano pequeño, los materiales resistentes al creep necesitan una distribución de tamaño de grano grande. Por esto, se hace esencial conocer los mecanismos de crecimiento de grano.

En el presente trabajo se analiza un modelo que ajusta el crecimiento de grano en materiales, monofásicos y bifásicos sometidos a tratamiento térmico. Este modelo permite analizar, en general, el crecimiento de grano en metales. Las constantes de ajuste del modelo consideran: el tamaño inicial de grano, el material que se está ensayando, las fases presentes (monofásico o bifásico) y la temperatura del ensayo.

Los resultados se obtienen por simulación, utilizando un método basado en autómatas celulares y Monte Carlo.

El autómata celular permite realizar actualizaciones de la estructura de granos del sistema a intervalos de tiempo fijo, y las reglas de actualización utilizadas por éste están dadas por el método de Monte Carlo, que se adapta perfectamente a sistemas con un gran número de grados de libertad.

El modelo permite estudiar el crecimiento de grano teniendo en cuenta la temperatura del sistema, la energía y la movilidad del borde de grano, la fracción y el tamaño de la partícula de segunda fase, y la energía de difusión de borde de grano.

El modelo es aplicado a los materiales aluminio, plomo y hierro-alfa. Los resultados de las simulaciones muestran cómo varían las constantes de ajuste del modelo para los distintos materiales, diferentes sistemas y diversas temperaturas de ensayo.

1 INTRODUCCION

La característica microestructural que está presente en todos los metales policristalinos, es el borde de grano. Es decir una interfase entre cristales de igual composición, pero de diferentes orientaciones cristalográficas. Esto genera en el material una estructura de granos. Cuando el material es sometido a tratamiento térmico, algunos granos comienzan crecer a costa de otros, con lo cual el tamaño de grano medio en el material aumenta. Este fenómeno se denomina crecimiento de grano.

Aunque se carece de una teoría cuantitativa capaz de explicar el crecimiento de granos en metales puros y aleaciones, se conoce mucho a cerca de las causas que lo producen. Una de las causas son las consideraciones energéticas de superficie, las cuales están asociadas con la energía de borde de grano y con la curvatura del borde; la otra causa es la difusión de átomos a través del límite de grano.

Cuando se estudia el crecimiento de grano en sistemas de dos fases (sistemas bifásicos) también deben considerarse las partículas de segunda fase, tanto en la fracción presente como en el tamaño medio de estas, ya que las partículas de segunda fase producen el anclado del borde de grano.

La literatura muestra (Martin y Doherty, 1976) (Reed Hill, 1986) que los datos de crecimiento de grano para metales puro se ajustan con el modelo de crecimiento de espuma de jabón, debido a que éstas crecen por consideraciones energéticas de superficie similares a las presentes en la estructura de granos (ecuación 1):

$$D^2 = D_0^2 + kt \quad (1)$$

Donde D_0 , t , y k son el tamaño inicial de grano, el tiempo y una constante de crecimiento respectivamente.

Si consideramos además la difusión de átomos a través del borde de grano, el cual es un proceso activado térmicamente, la constante k se puede reemplazar por (ecuación 2)

$$k = k_0 e^{-Q/RT} \quad (2)$$

Donde Q es el calor de activación para el proceso, T la temperatura del ensayo y R la constante internacional de gas.

Luego, la ley de crecimiento puede escribirse como se muestra en la ecuación 3:

$$D^2 - D_0^2 = tk_0 e^{-Q/RT} \quad (3)$$

Para datos de sistemas bifásico se aplica la ecuación empírica (Martin y Doherty, 1976) (Reed Hill, 1986) (ecuación 4):

$$D = kt^n \quad (4)$$

donde el exponente n , en la mayoría de los casos es menor al valor 0.5, encontrado para materiales puros.

Además se ha encontrado que el exponente n , no es constante para un metal o aleación dada si se modifica la temperatura del ensayo.

En este trabajo se analizan las curvas de crecimiento de grano, obtenidas por simulación mediante un algoritmo basado en autómatas celulares y el método de Monte Carlo propuesto por Cattaneo y Silvetti en 2008.

Se analiza el crecimiento de grano en los metales puros, aluminio, hierro- α , cobre y plomo, los cuales se ajustan por la ecuación 1. También se estudia una aleación bifásica de

aluminio, cuyos resultados se ajustan por dos métodos.

Para el primer ajuste se utiliza una ecuación similar a la [ecuación 2](#) y se indica en la [ecuación 5](#):

$$D = D_0 + kt^n \quad (5)$$

Para el segundo ajuste se usa una ecuación de crecimiento exponencial ([ecuación 6](#))

$$D = D_L + Ae^{-\frac{t}{\tau}} \quad (6)$$

2 RESULTADOS Y DISCUSION

2.1 Sistema Monofásico

Los resultados se obtuvieron por simulación utilizando el algoritmo desarrollado por [Cattaneo y Silveti](#) en 2008, el cual se basa en un autómata celular que utiliza el método de Monte Carlo como regla de actualización, el cual se implementó con Matlab.

La matriz de simulación utilizada tiene un tamaño de 300 x 300, con 100 orientaciones para granos de crecimiento normal. Se asume que cada sitio de matriz representa un tamaño de 2 μm de lado.

Los parámetros utilizados para los materiales monofásicos, aluminio, plomo, cobre y hierro- α , son:

Aluminio: $\gamma = 0,6 \text{ J/m}^2$, $Q = 15 \text{ kcal/mol}$, $T_f = 933\text{K}$

Plomo: $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$, $Q = 10 \text{ kcal/mol}$, $T_f = 600\text{K}$

Cobre: $\gamma = 0,53 \text{ J/m}^2$, $Q = 17 \text{ kcal/mol}$, $T_f = 1357\text{K}$

Hierro- α : $\gamma = 0,8 \text{ J/m}^2$, $Q = 33 \text{ kcal/mol}$, $T_f = 1173\text{K}$

Los valores de energía de borde de grano se tomaron de [Martin y Doherty \(1976\)](#) y los de la energía de activación para la difusión en borde de grano de [Gleiter y Chalmers \(1972\)](#).

Para el sistema aluminio monofásico, los resultados de las simulaciones obtenidos usando la [ecuación 3](#) se muestran en la [Figura 1](#). En la misma se puede observar una buena relación lineal. A partir de esas pendientes, y aplicando la ley de Arrhenius, se determina el calor de activación involucrado en el proceso, ajuste que se muestra en la [Figura 2](#).

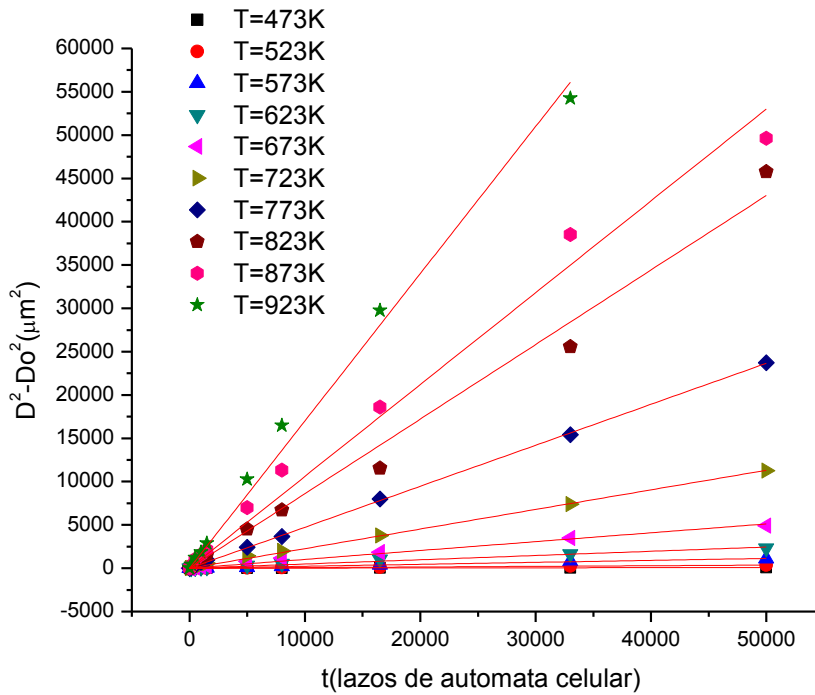


Figura 1. Crecimiento de grano, en sistema monofásico de aluminio.

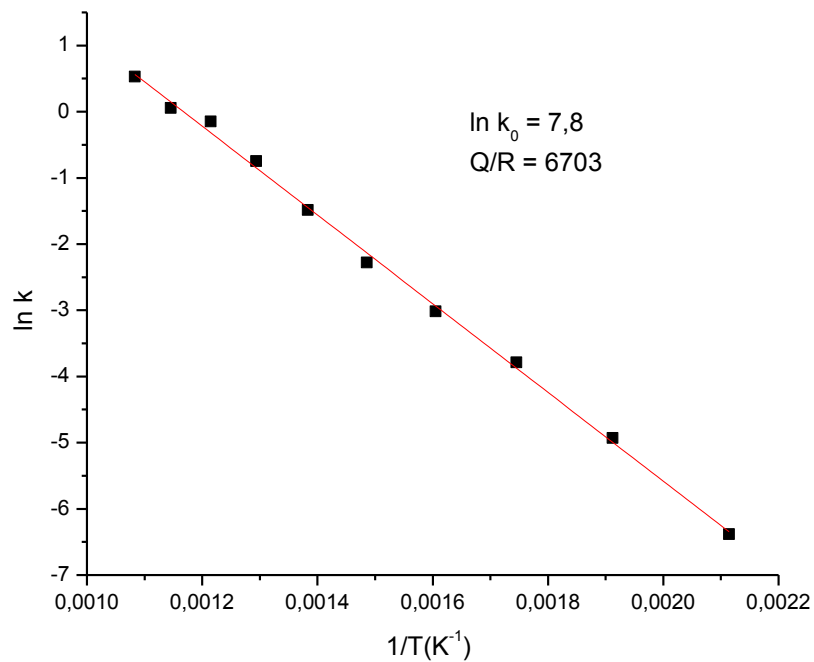


Figura 2. Determinación del calor de activación para el aluminio

Los calores de activación obtenidos para los sistemas analizados son:
 $Q_{\text{Aluminio}} = 13406 \text{ cal/mol}$

$$Q_{\text{Plomo}} = 9800 \text{ cal/mol}$$

$$Q_{\text{Hierro } \alpha} = 31324 \text{ cal/mol}$$

$$Q_{\text{Cobre}} = 15124 \text{ cal/mol}$$

Comparando estos valores con los datos experimentales de los calores de activación para difusión en borde de grano utilizado en la implementación del algoritmo de crecimiento de grano, vemos que son muy similares. Además de las Figuras 1 y 2 podemos ver que el crecimiento de grano es un proceso que está claramente activado por la temperatura.

2.2 Sistema Bifásico

Como sistema bifásico, se estudió un sistema de aluminio con partículas de segunda fase que no pueden disolverse. Se utilizaron distintas fracciones de partículas de segunda fase (f) con distintos tamaños medios de partículas (d).

Para realizar las simulaciones se utiliza una matriz de simulación tiene un tamaño de 300 x 300, con 100 orientaciones para granos de crecimiento normal y una orientación, diferente a las anteriores, para las partículas de segunda fase a las cuales se les impuso una condición para que no se disuelvan. Se asume que cada sitio de matriz representa un tamaño de 2 μm de lado.

En la Figura 3 se muestran las curvas de crecimiento de grano para aluminio con 2% de segunda fase y tamaño de partícula de segunda fase de 2 micrones de lado.

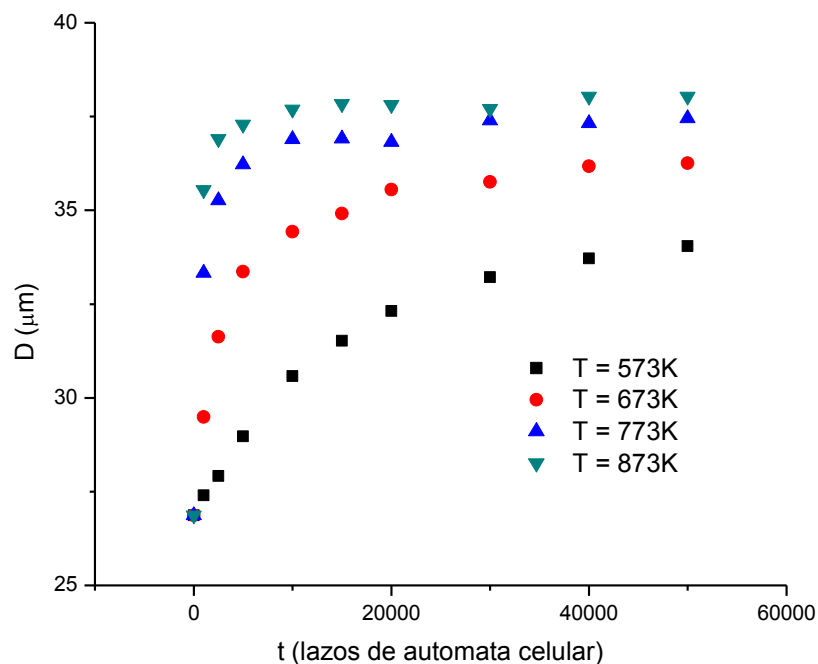


Figura 3. Crecimiento de grano. Para aluminio bifásico con 2% de partículas de segunda fase y tamaño de partícula de segunda fase de 2 μm de lado

Linealizando la ecuación 5, para ajustar los datos de crecimiento de grano, obtenemos la ecuación 7 de donde podemos determinar el exponente n y la constante k

$$\ln(D - D_0) = \ln k + n \ln(t) \quad (7)$$

En la Figura 4, se grafican los resultados del sistema aluminio bifásico, mostrado en la

Figura 3, utilizando la ecuación 7. Se observa que los datos no tiene una buena correspondencia con un ajuste lineal.

Si bien con los ajustes lineales se puede obtener alguna información importante respecto al comportamiento de n y k , se observa que estas constantes de ajustes dependen de la fracción de partículas, del tamaño de las mismas y de la temperatura a la que se realiza el ensayo.

En las Figuras 5 y 6 se muestran como varía el exponente n con el tamaño de partícula de segunda fase y con la fracción de la misma, respectivamente.

Si observamos con detenimiento la figura 3, se puede observar que cada curva de crecimiento, se podría ajustar por dos rectas una para tiempos bajo y otra para tiempos altos, esta última con pendiente menor que la primera.

Considerando esta última observación, donde tenemos dos rectas de ajuste para cada curva de crecimiento, y que los parámetros de ajuste dependen de la fracción y el tamaño de partículas, y de la temperatura, se hace muy difícil darle una interpretación a estas constantes de ajuste.

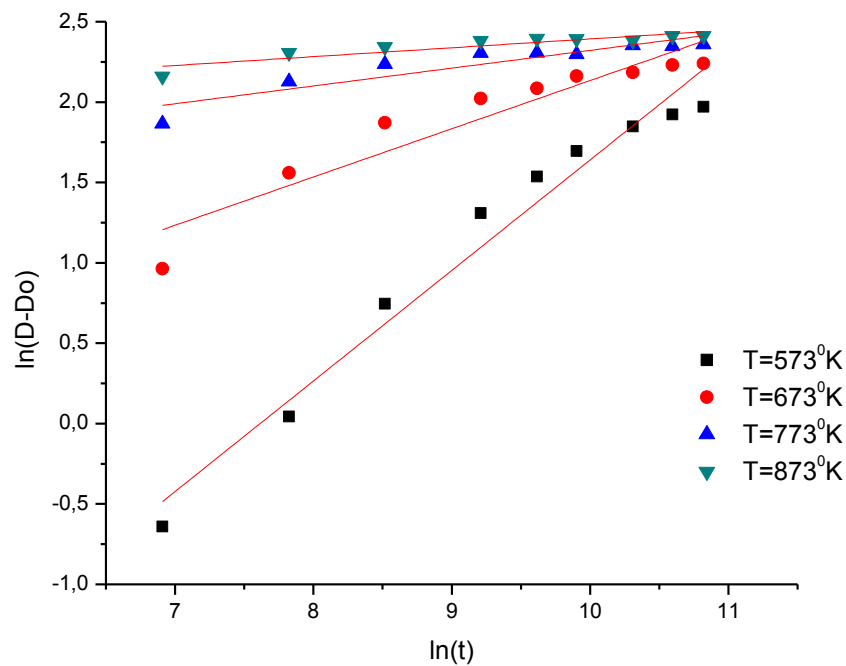


Figura 4. Aplicación de la ecuación 7 al crecimiento de grano de aluminio bifásico, con $f=2\%$ y $d=2\ \mu\text{m}$

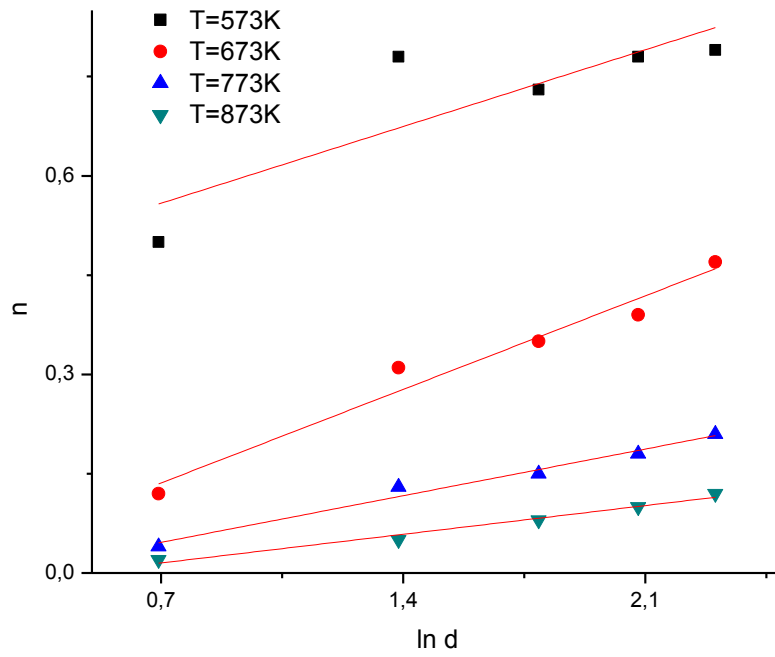


Figura 5. Variación del exponente n con el tamaño de partícula de segunda fase a distintas temperaturas de ensayo

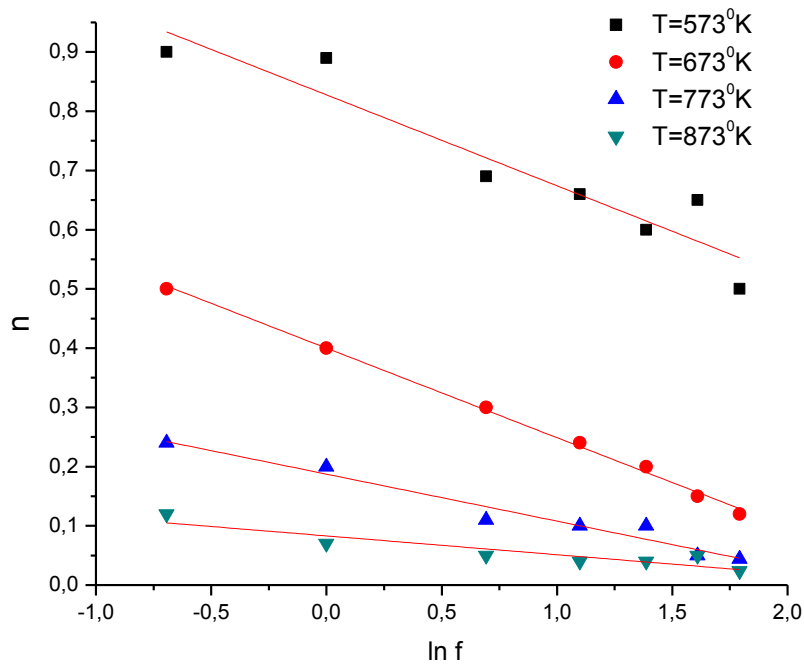


Figura 6. Variación del exponente n con la fracción de partícula de segunda fase a distintas temperaturas de ensayo

Si ajustamos los resultados de las simulaciones, utilizando una curva de crecimiento exponencial como la propuesta en la ecuación 6 $D = D_L + Ae^{-\frac{t}{\tau}}$, se obtienen buenos ajustes de los datos y las constantes de ajuste presentan una interpretación coherente con los datos del sistema bifásico.

En la figura 7 se muestra el ajuste exponencial para los datos de la Figura 3.

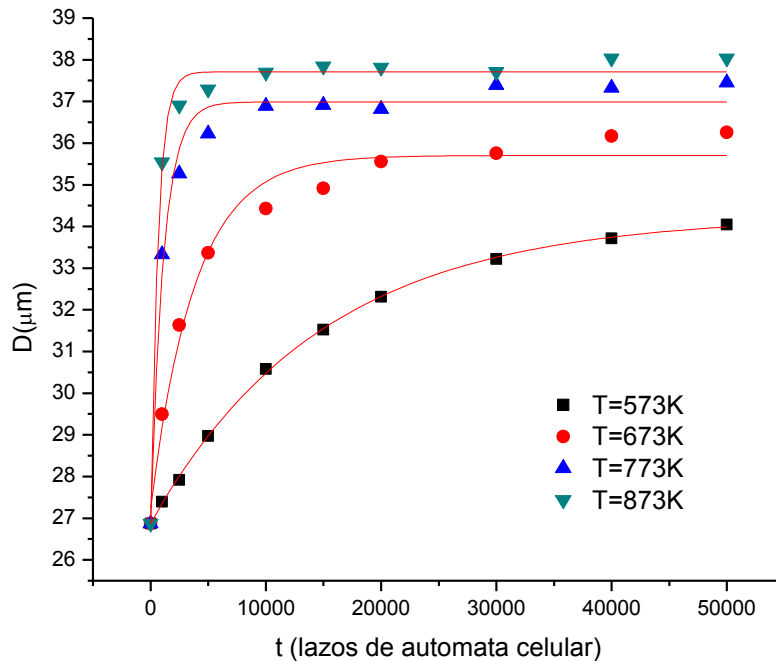


Figura 7. Ajuste con crecimiento exponencial. Para de aluminio bifásico, con $f=2\%$ y $d=2\ \mu\text{m}$

Del análisis de las constantes de ajuste, obtenemos que D_L representa el tamaño de grano límite, es decir, el máximo tamaño de grano que alcanza el sistema bifásico durante un crecimiento de grano isotérmico.

En la Figura 8 se grafica el tamaño de grano límite en función de la temperatura para distintos sistemas. Podemos ver que existe una relación lineal entre las variables, y si observamos la ordenada al origen de la recta de ajuste, la misma se aproxima al valor del tamaño de grano inicial, lo cual es coherente ya que a una temperatura de 0K el tamaño de grano no debe variar.

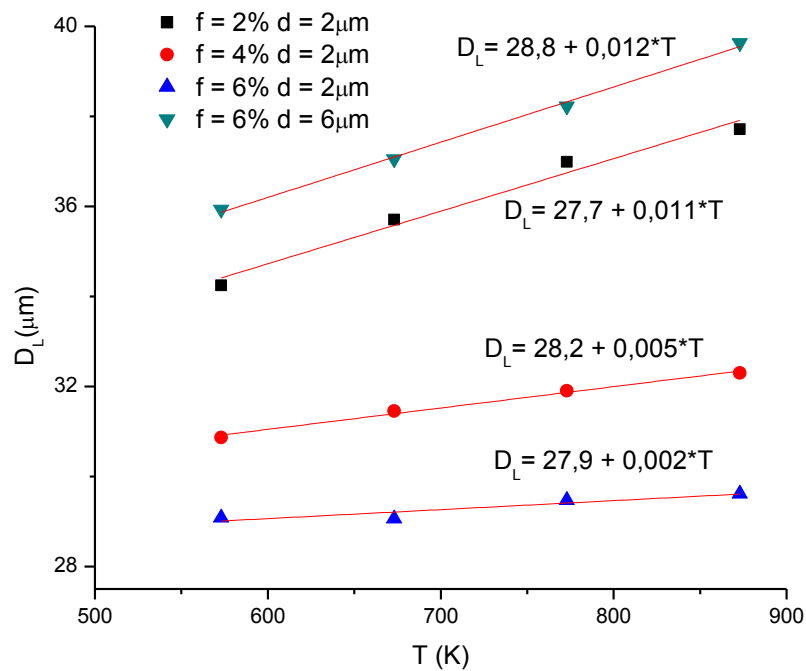


Figura 8. Variación del tamaño de grano límite con la temperatura. Para distintos sistemas.

Con respecto a la constante A , observamos que toma valores negativos y es igual a la diferencia entre el tamaño inicial de grano y el tamaño de grano límite.

Luego, como se indica en la [ecuación 8](#)

$$D_L + A = D_0 \quad (8)$$

En la [Figura 9](#) se grafica la ecuación 8 para el sistema de 2% de fracción de partícula de segunda y 2 μm de lado, para las distintas temperaturas de ensayos.

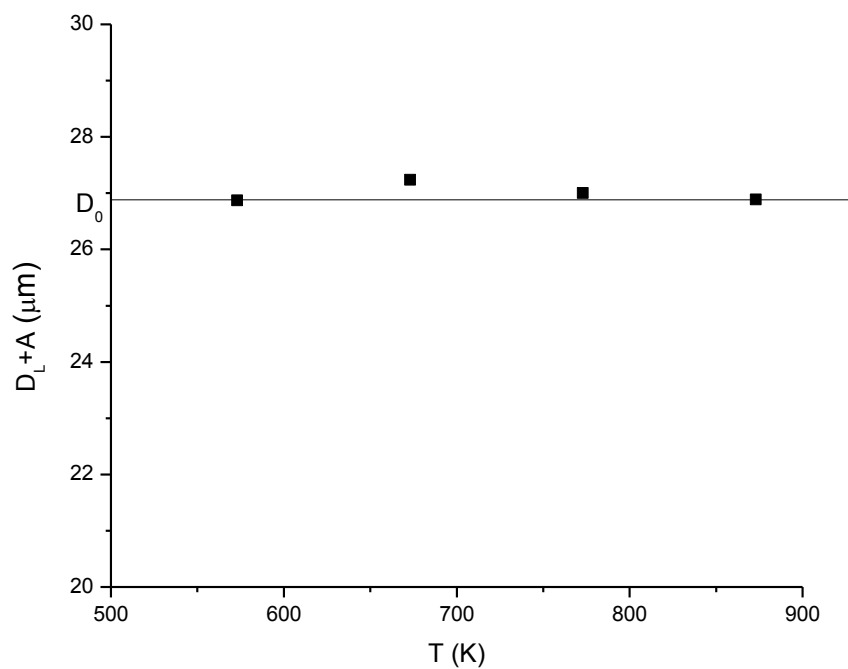


Figura 9. Gráfico de $D_L + A$ con la temperatura.

La constante τ , es una constante de tiempo tal que para un tiempo $t = 3\tau$ el grano creció más del 95% del tamaño de grano límite.

En la Figura 10 se muestra cómo varía la constante de tiempo con la temperatura, para los distintos sistemas. En ella podemos observar que a mayor temperatura la constante de tiempo disminuye y que para altas temperaturas la constante de tiempo es independiente del sistema.

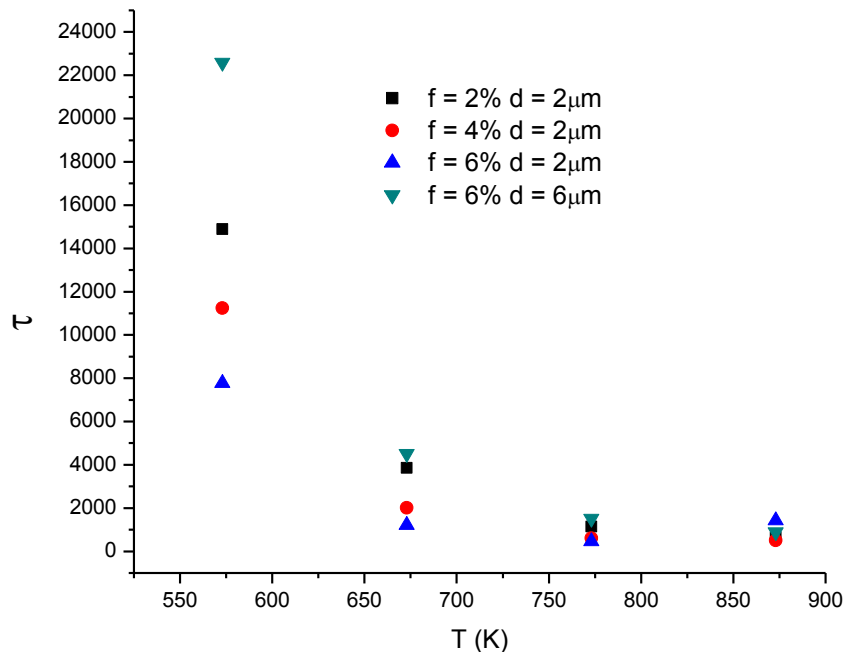


Figura 10. Variación de la constante de tiempo con la temperatura. Para distintos sistemas.

Derivando la [ecuación 6](#) respecto del tiempo, se obtiene la velocidad de crecimiento de grano, como puede observarse en la [ecuación 9](#):

$$V = -\frac{A}{\tau} e^{-t/\tau} \quad (9)$$

Esta expresión es no negativa (recordemos que A es menor que cero), y para tiempos muy grandes se hace cero, lo cual indica que el grano no crece, que alcanzó su tamaño límite.

El valor de la velocidad inicial de crecimiento de grano, se obtiene la [ecuación 10](#) de reemplazar en la [ecuación 9](#) el tiempo t por cero

$$V_0 = -\frac{A}{\tau} \quad (10)$$

En la [Figura 11](#) se observa que la velocidad inicial varía con la temperatura según la ley de Arrhenius y que las pendientes de las rectas de ajuste son similares para todos los sistemas, obteniéndose un calor de activación de 12000 cal/mol. Este valor es comparable al valor experimental del calor de difusión en borde de grano del aluminio, lo cual es razonable ya que los granos que crecen son de aluminio (parte mayoritaria del sistema bifásico).

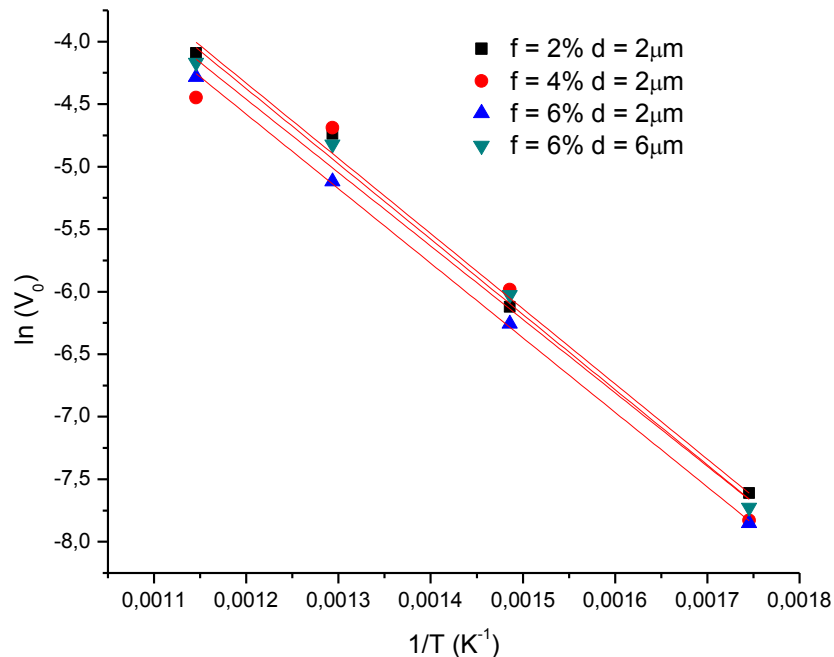


Figura 11. Variación de la constante de la velocidad inicial con la temperatura. Para distintos sistemas.

3 CONCLUSIONES

Con respecto a los sistemas monofásicos, las ecuaciones 1, 2 y 3 producen un buen ajuste del crecimiento de grano, a la vez que permiten determinar el calor de activación para el crecimiento de grano, el cual toma valores similares a los correspondientes a la difusión en borde de grano.

Para los sistemas bifásicos se aplicaron las ecuaciones 5 y 6 para ajustar el crecimiento de grano.

La ecuación 5 no provee un buen ajuste y además se hace muy difícil encontrar una interpretación de los parámetros de crecimiento que se corresponda con las variables del sistema, es decir la fracción y tamaño de partícula de segunda fase, y la temperatura del ensayo.

La ecuación 6 correspondiente a un ajuste de crecimiento exponencial, proporciona importante información, como lo es el tamaño de grano límite que alcanzará el sistema (D_L) y el tiempo necesario para que el sistema alcance ese tamaño de grano límite $t = 3\tau$.

Además el ajuste producido por la ecuación 6, permite ver que el crecimiento de grano es un proceso simplemente activado por temperatura como se muestra en la Figura 11.

REFERENCIAS

- Cattaneo, C.A.; Silvetti, S.P. Modelo híbrido para el crecimiento de grano aplicando autómatas celulares y método de Monte Carlo. *Mecánica Computacional*. XXVII: 2385-2395. 2008.
- Gleiter H. y Chalmers B. *High-Angle Grain Boundaries*. Pergamon Press. 1972.
- Martin J. W. y Doherty R. D. *Stability of Microstructure in Metallic Systems*, Cambridge University Press. 1976.
- Reed Hill, R.E. *Principios de Metalurgia Física*. Cia. Editorial Continental. 1986.