

MODELO DE CRECIMIENTO DE GRANO PARA UN SISTEMA BIFASICO

Carlos A. Cattaneo 1, Silvia P. Silvetti 2

1Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano Sur 1912, CP: 4200 Santiago del Estero, Email:

cacatta@unse.edu.ar

2Facultad de Matemáticas Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba.

RESUMEN

Se presenta un modelo para el crecimiento de grano en sistemas bifásicos. El cual considera el crecimiento de un grano esférico de la matriz en una distribución uniforme de partículas de segunda fase de tamaño constante. El modelo presentado, es validado mediante simulaciones de crecimiento de grano en sistemas bifásicos, utilizando el método de Monte Carlo. Estas se realizaron variando la fracción de volumen de partículas de segunda fase y variando el tamaño de las mismas. También se presenta una nueva relación para el tamaño de grano límite para un sistema bifásico.

Palabras clave: Crecimiento de Grano, Partículas, Tamaño de grano Límite

INTRODUCCIÓN

En general la cinética de crecimiento de recocado, recristalización y crecimiento de grano en un material policristalino, está fuertemente influenciada por la presencia de partículas de segunda fase, como precipitados o inclusiones insolubles. Las cuales actúan sobre la movilidad del borde de grano, produciendo un fuerte efecto del anclado del mismo. A este mecanismo se lo denomina efecto Zener para el anclado de borde de grano.

La inhibición del crecimiento de grano, por partícula de segunda fase, presupone que cuando una partícula se encuentra en el contorno de grano se debe crear una determinada área para que el borde de grano continúe migrando y tal etapa involucra un consumo de energía. El efecto de la partícula de segunda fase es el de provocar una variación en la forma del borde a medida que éste avanza sobre la partícula de segunda fase.

A pesar de que el efecto de inhibición por partículas de segunda fase se conoce desde el inicio de este siglo, solamente después de la comunicación de Zener [1] a Smith se tiene una relación matemática entre el tamaño de grano límite y el tamaño de las partículas de segunda fase:

$$R = 4r / 3f \quad (1)$$

donde: R: radio de grano (curvatura)

r: radio de la partícula de segunda fase

f: fracción volumétrica de partículas de segunda fase

Sin embargo, se ha encontrado que el tamaño de grano límite obtenido experimentalmente es mucho menor que el valor calculado a través de la ecuación (1) [2,3,4].

Grey y Higgins [5,6] proponen una relación empírica en la cual la velocidad de crecimiento de grano está frenada por un término finito independiente de la velocidad, pero asociado con la distribución de soluto. La existencia de este valor finito sugiere que el grano crecerá hasta un tamaño de grano final finito.

En el presente trabajo se presenta un nuevo modelo para el crecimiento de grano en un sistema bifásico, del cual se deduce una expresión para el término de frenado propuesto por Grey y Higgins. Como consecuencia se obtiene una nueva relación para el tamaño de grano límite que, no sólo tiene en cuenta el tamaño y la fracción de partículas de segunda fase, sino también la energía de borde de grano de la matriz y la energía de interfase entre la partícula de segunda fase y la matriz.

MODELO DE CRECIMIENTO DE GRANO ESFERICO EN UN SISTEMA BIFASICO

Consideremos el crecimiento de un grano esférico en un sistema bifásico, en el cual tenemos una distribución uniforme de partículas de segunda fase, de forma esférica y de radio d , y sea f la fracción volumétrica de partículas de segunda fase.

En la **Figura 1** se esquematiza la interacción entre un borde de grano y una partícula esférica, donde definimos las variables que están participando, esto es: P_e presión exterior; P_i presión interior; σ energía de borde de grano de la matriz por unidad de superficie; R radio del grano; d radio de la partícula de segunda fase; y Σ energía de interfase por unidad de superficie (energía entre la partícula de segunda fase y la matriz)

Tenemos que notar que la curvatura del borde de grano, en la partícula de segunda fase, es de signo contrario a la del grano que crece, luego, la fuerza generada por la energía interfacial entre la partícula de segunda fase y la matriz, apunta en sentido opuesto a la fuerza generada por la energía de borde de grano.

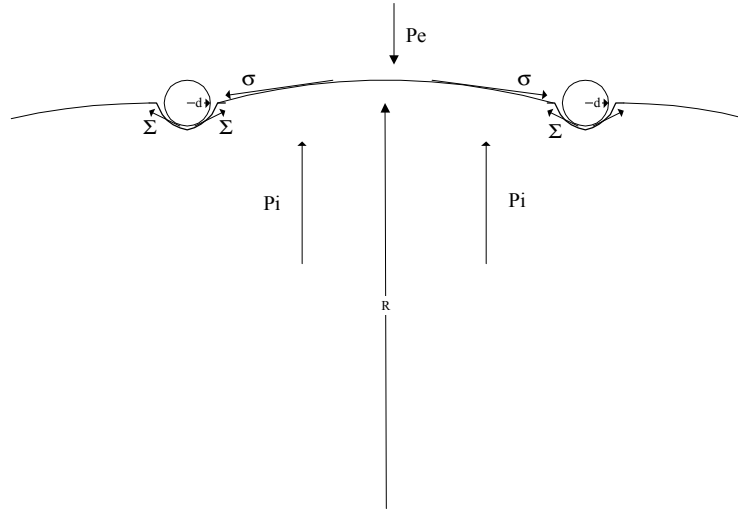


Figura 1: Interacción entre un borde de grano y una partícula esférica

La separación entre partículas λ esta da por:

$$\lambda = \left(\frac{4\pi}{3f} \right)^{\frac{1}{3}} d$$

Y el número de partículas en la superficie del grano, N_{pg} por:

$$N_{pg} = \frac{4\pi R^2}{\lambda^2}$$

Considerando que la interfase entre la partícula de segunda fase y el borde de grano que avanza es de media partícula, y realizando el balance de fuerzas, se obtiene la fuerza impulsora para el crecimiento de grano

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R} - (36\pi)^{\frac{1}{3}} \frac{\Sigma}{d} f^{\frac{2}{3}}$$

Como la velocidad de crecimiento de grano es proporcional a esta fuerza impulsora, obtenemos

$$\frac{dR}{dt} \propto \frac{2\sigma}{R} - (36\pi)^{\frac{1}{3}} \frac{\Sigma}{d} f^{\frac{2}{3}} \quad (2)$$

La cual modifica a la ecuación de Grey y Higgins. El segundo término del segundo miembro de la ecuación (2) nos da la relación para el término de frenado del borde de grano en función de los parámetros de un sistema bifásico, mientras que el primer término es la conocida relación para el crecimiento de grano de un sistema monofásico.

Podemos rescribir la ecuación (2) de la forma:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\mu}{R} - Z \quad (3)$$

con μ y Z constantes tales que:

$$\mu \propto 2\sigma \quad (4)$$

$$Z \propto \frac{f^{\frac{2}{3}}}{d} \quad (5)$$

Sabemos que la velocidad de crecimiento de grano para un sistema bifásico es menor que para uno monofásico, por lo tanto, la ecuación de crecimiento tendrá un término que disminuya la velocidad con respecto a la velocidad del sistema monofásico, término representado por la constante Z en la ecuación (3).

Teniendo en cuenta que la velocidad de crecimiento (ec. (3)) debe ser mayor o igual que cero

$$\frac{\mu}{R} - Z \geq 0 \Rightarrow R \leq \frac{\mu}{Z} \quad (6)$$

Con lo que obtenemos la expresión para el tamaño de grano límite:

$$R_L = \frac{2d\sigma}{(36\pi)^{\frac{1}{3}} \Sigma f^{\frac{2}{3}}} \quad (7)$$

Integrando la ecuación (3) se obtiene la conocida relación para la cinética entre el tamaño de grano en un sistema bifásico y el tiempo [5,6],

$$\frac{R_0 - R}{Z} + \frac{\mu}{Z^2} \ln \left(\frac{\mu - ZR_0}{\mu - ZR} \right) = t \quad (8)$$

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para estudiar la validez del modelo desarrollado, se realizaron distintas simulaciones aplicando el método de Monte Carlo para Crecimiento de Grano, la rutina utilizada trabaja tanto con sistemas monofásicos como bifásicos. Para los sistemas bifásicos se tiene en cuenta que las partículas de segunda fase mantienen el tamaño sin engrosar ni disolverse [7].

Se estudiaron los siguientes casos:

Caso 1: se simula un sistema monofásico con un tamaño de grano inicial $R_0 = 10,5 \mu\text{m}$, los resultados obtenidos se ajustaron mediante la ecuación correspondiente para el crecimiento de grano en un sistema monofásico

$$\frac{R^2 - R_0^2}{2\mu} = t$$

con lo cual se estimó un $\mu = 1,5$.

Caso 2: se simula un sistema bifásico con un tamaño de grano inicial $R_0 = 10,5 \mu\text{m}$ y tamaño de partícula de segunda fase $d = 1 \mu\text{m}$. Se analizan distintas fracciones de volumen de partícula de segunda fase, 0,2 %, 0,7%, 1 %, 1,5 %, 2 %, y 3 %. Los resultados obtenidos se ajustaron con la ec.(8) para un $\mu = 1,5$; Con lo cual se estimó el Z correspondiente para cada fracción de volumen. Los resultados de la simulación se muestran en la **figura 2**.

Caso 3: se simula un sistema bifásico con un tamaño de grano inicial $R_0 = 10,5\mu\text{m}$ y con una fracción de volumen de partícula de segunda fase del 3 %. Se consideran distintos tamaños de partícula de segunda fase, esto es: 1 μm , 2 μm , 3 μm , 4 μm , 5 μm y 6 μm . Los resultados obtenidos se ajustaron con la ecuación (8) para un $\mu = 1,5$; Con lo cual se estimó el Z correspondiente para cada tamaño de partícula de segunda fase. Los resultados obtenidos se muestran en la **figura 3**.

Es importante notar que los valores de Z obtenidos, a través del ajuste de los resultados, por medio de la ecuación (8), aplicados a la ecuación (6), arroja a un tamaño de grano que coincide con los resultados de las simulaciones.

Además se analizaron las relaciones entre Z , la fracción y el tamaño de partícula de segunda fase. En la **figura 4** se muestra la variación de Z con la fracción de partícula de segunda fase. Del análisis de los resultados, indicados en la **Figura 4**, se concluye que $Z \propto f^{0,63}$, lo cual está en acuerdo con la ecuación (5).

En la **figura 5** se muestra la variación de Z con el tamaño de la partícula de segunda fase. Del análisis de los resultados, se concluye que $Z \propto d^{-0,9}$ lo cual está en acuerdo con la ecuación (5).

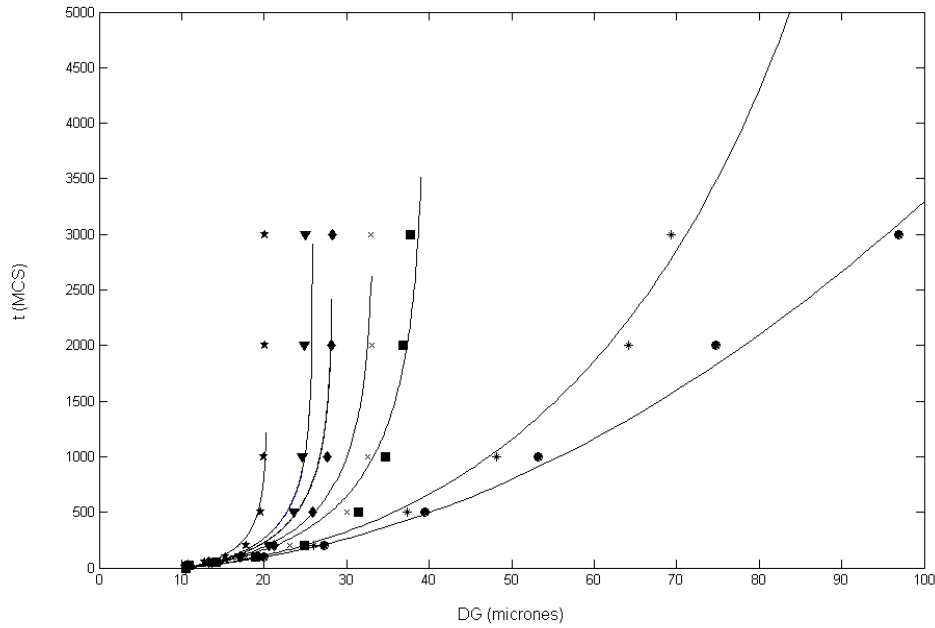


Figura 2: Crecimiento de grano versus tiempo en un sistema bifásico, para distintas fracciones de volumen de partículas de segunda fase y tamaño de partícula de segunda fase de 1 micrón de radio. Las líneas corresponden al mejor ajuste obtenido por la ecuación (18). • sist. monofásico $\mu = 1.5$; ★ sist. bif. 0,2% $\mu = 1.5$ $Z = 0.013$; ■ sist. bif. 0,7% $\mu = 1.5$ $Z = 0.038$; ✕ sist. bif. 1 % $\mu = 1.5$ $Z = 0.045$; ◆ sist. bif. 1.5 % $\mu = 1.5$ $Z = 0.053$; ▲ sist. bif. 2% $\mu = 1.5$ $Z = 0.058$; ★ sist. bif. 3% $\mu = 1.5$ $Z = 0.074$.

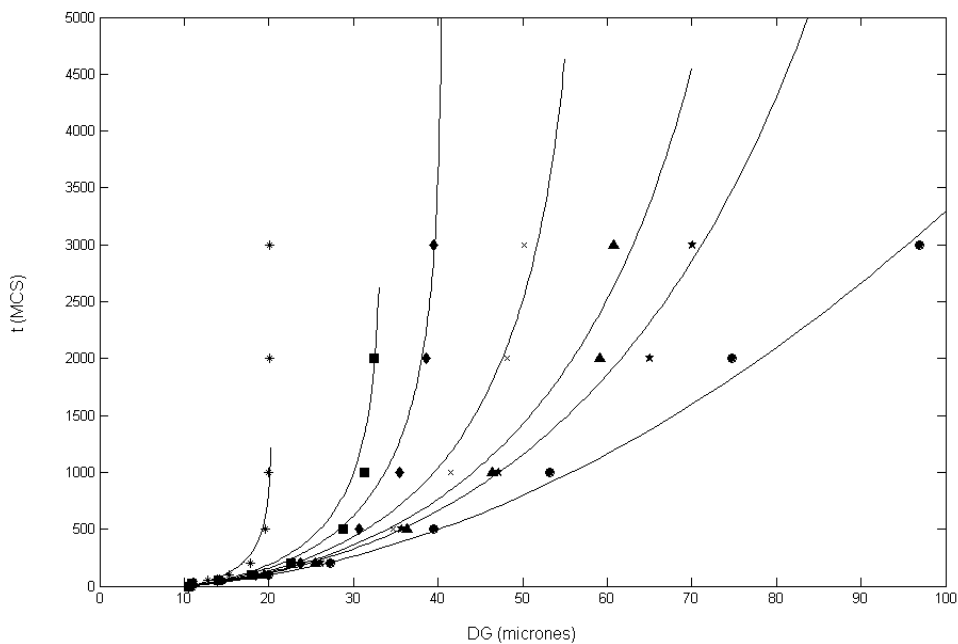


Figura 3: Crecimiento de grano versus tiempo en un sistema bifásico, para distintos tamaños de partículas de segunda fase y un porcentaje de partículas de segunda fase del 3%. Las líneas corresponden al mejor ajuste obtenido por la ecuación (18).

• sist. monofásico $\mu = 1.5$; ★ sist. bif. $d = 1$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.074$; ■ sist. bif. $d = 2$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.045$; ◆ sist. bif. $d = 3$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.037$; ✕ sist. bif. $d = 4$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.028$; ▲ sist. bif. $d = 5$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.022$; ★ sist. bif. $d = 6$, $\mu = 1.5$ $Z = 0.019$.

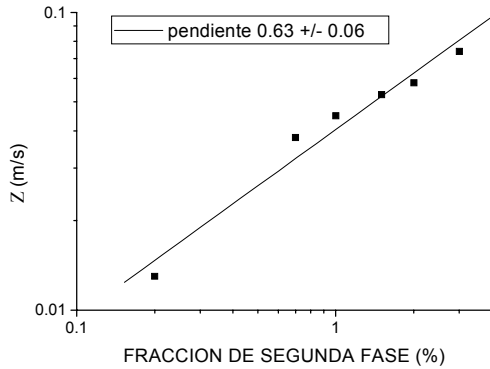


Figura 4: Variación de Z en función de la fracción de partículas de segunda fase, según la ec.(15)

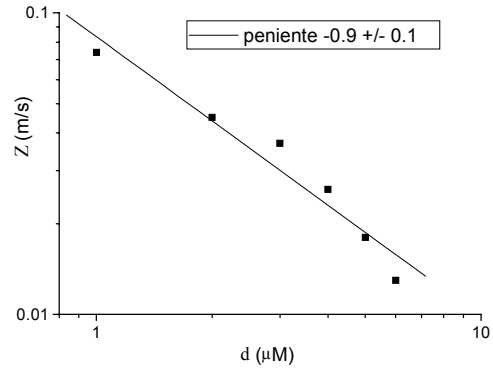


Figura 5: Variación de Z en función del tamaño de partículas de segunda fase, según la ec.(15)

CONCLUSIONES

1. Del desarrollo del modelo para el crecimiento de grano en un sistema bifásico, se obtiene una nueva expresión para el tamaño de grano límite ecuación (7). La cual tiene en cuenta nuevos parámetros que la relación de Zener, no considera. Estos parámetros son la energía de borde de grano de la matriz y la energía de interfase entre la matriz y las partículas de segunda fase.
2. La expresión encontrada para el tamaño de grano límite indica que éste es directamente proporcional al tamaño de partícula de segunda fase e inversamente proporcional a la fracción de partícula de segunda fase elevada a la dos tercios.
3. Del análisis de la ecuación (3) vemos que la constante Z es la encargada de frenar la velocidad de crecimiento de grano, por lo tanto Z es proporcional a la fuerza de anclado producida por la partícula de segunda fase. Esta fuerza de anclado es directamente proporcional a la fracción de partícula de segunda fase elevada a la dos tercios y a la energía de interfase entre la matriz y las partículas de segunda fase e inversamente proporcional al tamaño de partícula de segunda fase (ecuación (2)).
4. El análisis de los resultados obtenidos por la simulación de Monte Carlo, indican una excelente correspondencia con la ecuación (5) obtenidas a través del modelo presentado.

REFERENCIAS

1. Smith C.S.; Transaction AIME, Vol. 175, N° 2, 15-51 (1948).
2. Nes E., Ryum N., Hunder O.; Acta Metallurgica, Vol. 33, N° 1, 11-22, (1985)
3. Kaspar R., Mahmoud N.; Materials Science and Technology, Vol. 7, 249-254, Mar. (1991)
4. Zhengfung Q.; Transactions of the Metals Heat Treatment, Vol. 2, N° 6, 9-19 (1985)
5. Grey, E.A. and Higgins, G.T. (1973) Acta Met. 21, 309
6. Grey, E.A. and Higgins, G.T. (1972) Scripta Met. 6, 253
7. Cattaneo Carlos Alberto; Evolución de Tamaño de Grano en Aceros Eléctricos de Bajo Carbono, Tesis de Magíster, FCEyT-UNSE (2004)