

**EVOLUCION DEL TAMAÑO DE GRANO EN ACEROS
ELÉCTRICOS DE BAJO CARBONO**

Por

CARLOS ALBERTO CATTANEO

Tesis para acceder al grado de
Magister en Métodos Numéricos
y Computacionales en Ingeniería

Director

Dra. Silvia Patricia Silvetti



2004

Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías
Universidad Nacional de Santiago del Estero

A Mis Chicas

ACTA

En la ciudad de Santiago del Estero, sede la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología de la Universidad Nacional de Santiago del Estero, siendo las 18:00 horas del día 20 de Febrero del 2004, se reúnen los integrantes del Jurado de Tesis del candidato, Lic. en Física Carlos Cattáneo, DNI N° 16.744.052, de la Carrera de Posgrado *Magister en Métodos Numéricos y Computacionales en Ingeniería*, integrado por: Dra. Beatriz López de Mishima de la Universidad Nacional de Santiago del Estero, Dr. Carlos Bulde, de la Universidad Nacional de Córdoba, y el Dr. Guillermo Físe, de la Universidad Nacional de Tucumán, quienes han realizado la lectura del trabajo de tesis de Magister titulado *Evolución del Tamaño de Grano en Aceros Eléctricos de Bajo Carbono* y emitido su evaluación en forma escrita, las que se adjuntan a la presente.

Complimentada la defensa oral y pública a cargo del Lic. Carlos Cattáneo, entre las 16:30 hs y las 17:50 hs del día de la fecha, los miembros del Jurado emiten el presente dictamen:

- 1) El Candidato desarrolló una exposición clara, apoyado con medios visuales, y demostrando solvencia en el tema de la tesis.
- 2) Luego de la exposición el Candidato respondió las preguntas del Jurado, las cuales abarcaron diferentes temas relacionados con la tesis. Esta etapa de preguntas se llevó a cabo durante un periodo de tiempo de 45 minutos. El Candidato respondió a todas las preguntas en forma criteriosa y con solvencia, demostrando además un conocimiento acabado de sus líneas de investigación en la tesis y de otras futuras que surgen a partir de sus resultados.
- 3) La tesis del Lic. Cattáneo constituye una contribución original a la aplicación de los métodos numéricos y computacionales para el análisis y resolución de problemas de las ciencias aplicadas, en particular en lo relacionado a la evolución de granos en aceros eléctricos de bajo carbono. Entre sus aportes se destacan los siguientes:
 - El desarrollo de un algoritmo numérico basado en el Método de Monte Carlo para el análisis de la evolución del tamaño de granos de sistemas monolámicos planos, representativos de aceros eléctricos de bajo carbono.
 - La extensión del algoritmo numérico para el análisis de la evolución del tamaño de granos en sistemas bifásicos y de la influencia de la textura en la velocidad de dicha evolución.
 - El desarrollo de un método para inferir la cinética de crecimiento de grano a partir de mediciones de textura.
 - La extensión del método numérico para predecir el crecimiento de grano en un sistema bifásico en presencia de partículas de segunda fase.
 - La verificación de la capacidad predictiva de los algoritmos numéricos desarrollados por el Candidato mediante la comparación con datos experimentales.

Por estas contribuciones novedosas y por el nivel de conocimiento demostrado por el Lic. Cattáneo durante la defensa de tesis, el Jurado da por aprobada la Tesis de la Carrera de Magister en Métodos Numéricos y Computacionales en Ingeniería denominada "*Evolución del Tamaño de Grano en Aceros Eléctricos de Bajo Carbono*", del Lic. Física Carlos Cattáneo, como así también, su defensa pública, otorgando la calificación: 5 (cinco).

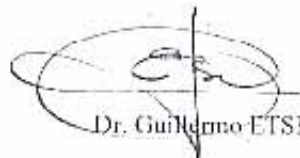
Sin más, y siendo las dieciocho horas de la fecha citada al inicio, se firman tres ejemplares de un mismo tenor y a un solo efecto.-----



Dr. Carlos BUDDE



Dra. Beatriz MISHINA



Dr. Guillermo ETSE

INDICE

CAPÍTULO I	1
CRECIMIENTO DE GRANO	1
1.1. ESTRUCTURAS DE EQUILIBRIO	1
1.2. MECANISMOS DE MIGRACIÓN DE LOS BORDES DE GRANO	4
1.2.1. Mecanismo atomístico.....	5
1.2.2. Mecanismo no-atomístico.....	5
1.3. CRECIMIENTO NORMAL DE GRANO	9
1.4. CRECIMIENTO ANORMAL DE GRANO	9
1.5. INHIBICIÓN DEL CRECIMIENTO NORMAL DE GRANO	10
REFERENCIAS CAPÍTULO I.....	14
CAPÍTULO II	16
METODO DE MONTE CARLO	16
2.1. EL MÉTODO MONTE CARLO	16
2.2. EL MÉTODO MONTE CARLO APLICADO AL CRECIMIENTO DE GRANO	18
2.2.1. Modelo de Srolovitz.....	18
2.2.2. Algoritmo de Radhakrishnan	21
2.2.3. Modelo de Mehnert para la incorporación de la textura	22
2.2.4. Incorporación del fenómeno de anclaje por partículas de segunda fase.....	23
2.3. DESARROLLO DEL SOFTWARE	23
2.3.1. Datos iniciales para la simulación	23
2.3.2. Generación de la microestructura.....	24
REFERENCIAS CAPÍTULO II	25
CAPÍTULO III	26
PROCEDIMIENTO Y RESULTADOS EXPERIMENTALES	26
3.1. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL.....	26
3.2 . RESULTADOS EXPERIMENTALES.....	28
3.2.1. Descarburación.....	28
3.2.2. Evolución microestructural	28
3.2.3. Evolución de la textura.....	31
3.3 . CONCLUSIONES	33
REFERENCIAS CAPÍTULO III.....	34
CAPÍTULO IV	35
RESULTADOS DE LA SIMULACION	35
4.1. INTRODUCCION.....	35
4.2. MARCO TEORICO.....	36
4.3. RESULTADOS Y DISCUSION	37
4.3.1 Caso 1 : Sistema Monofásico	37
4.3.2 Caso 2 : Sistema Bifásico	38
4.3.3 Sistemas Monofásicos y Bifásicos Texturados.....	40
4.3.4 Caso 5. Sistema Bifásico Texturado, con disolución de las partículas de segunda fase.....	41
4.3.5. Análisis sobre datos experimentales.....	45
4.3.6. Análisis de crecimiento anormal de grano.	48
4.4 . CONCLUSIONES	54
REFERENCIAS CAPÍTULO IV	56

<i>CAPÍTULO V</i>	57
MODELO DE CRECIMIENTO DE GRANO	57
5.1. CRECIMIENTO DE GRANO EN UN SISTEMA MONOFÁSICO.	57
5.2. CRECIMIENTO DE GRANO EN UN SISTEMA BIFÁSICO.	59
5.3. RESULTADOS Y DISCUSION	62
REFERENCIAS CAPÍTULO V	66
ANEXO 1	67
Diagramas de rayos X obtenidos a distintas temperaturas y tiempos de envejecido	67
ANEXO 2	71
Diagramas de Flujo	71

CAPÍTULO I

CRECIMIENTO DE GRANO

El conocimiento de los granos y sus contornos en metales no es reciente ¹. Ya en 1899 se menciona ^{2,3} que cada uno de los granos que aparecen en una superficie pulida y atacada era, en realidad, un monocristal.

Rosenhain ¹⁻³ propuso una de las primeras teorías que procuró explicar el crecimiento de grano, mientras que Burke ⁴, Beck ⁵ y Pande ⁶ fueron los precursores de la explicación del potencial termodinámico para el crecimiento de grano, tal como se acepta hoy. Una disminución de la energía asociada con la presencia de bordes de grano. En realidad, fue Jeffries ⁷ quien afirmó que la presencia de bordes de grano era una condición de mayor energía y que, por lo tanto, debería llevar a una condición de menor energía - a la de un monocristal.

1.1. ESTRUCTURAS DE EQUILIBRIO

Una estructura de granos es un resultado del compromiso entre los requisitos que operan entre las partes individuales, y los que justifican la ocupación del espacio ⁸.

La representación algebraica del perfil de equilibrio entre los granos se puede encontrar a partir de la suposición de que tres bordes se encuentren en un punto, una unión triple (Fig. 1.1) ^{9,10}. En el equilibrio, la variación de energía libre es cero y por lo tanto, la ecuación que representa el sistema es:

$$\gamma_1 - \gamma_2 \cos \alpha_2 - \gamma_3 \cos \alpha_3 + (d\gamma_2/d\alpha_2) \operatorname{sen} \alpha_2 + (d\gamma_3/d\alpha_3) \operatorname{sen} \alpha_3 = 0 \quad [1.1]$$

donde los términos $[(d\gamma_2/d\alpha_2) \operatorname{sen} \alpha_2]$ y $[(d\gamma_3/d\alpha_3) \operatorname{sen} \alpha_3]$ son llamados de torque. Cuando estos términos de torque son cero, la ecuación se reduce a:

$$\gamma_1 - \gamma_2 \cos \alpha_2 - \gamma_3 \cos \alpha_3 = 0 \quad [1.2]$$

Suponiendo que la energía libre de superficie de los bordes sea constante, $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3$, se puede llegar a ángulos de equilibrio de 120° ⁸. Por lo tanto, en dos dimensiones, una estructura de equilibrio será aquella formada por hexágonos, que poseen contornos rectos (radios de curvatura tendiendo a infinito) y ángulos de equilibrio de 120° en sus vértices.

Bidimensionalmente, una estructura formada completamente por hexágonos es difícil de encontrar¹¹, por causa de la naturaleza estocástica de los granos¹². Así, en una estructura granular, es muy común encontrar granos cuyo número de lados sea diferente de seis. Estos, por tanto, tenderán a curvarse para que se consiga el ángulo de equilibrio de 120° .

Teniendo en vista la contribución del ángulo de equilibrio, Smith¹² estudió las relaciones topológicas en una estructura de polígonos. En dos dimensiones, mostró que la siguiente relación era válida para polígonos continuos:

$$\Sigma P_n (6-n) - E_b = 6 \quad [1.3]$$

- donde: P_n : número de polígonos de n lados
 n : número de lados del polígono
 E_b : número de lados del contorno externo del arreglo.

Se ha demostrado¹³ que granos relativamente grandes poseen más lados mientras que los granos pequeños poseen menos de seis lados.

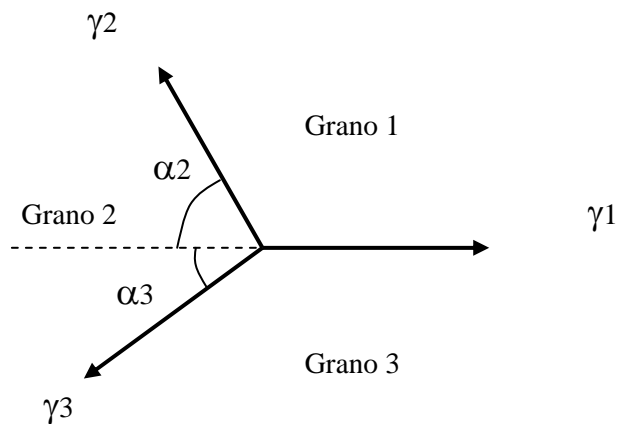


Figura 1.1: Encuentro de granos en una unión triple

Suponiendo que todas las células de un arreglo bidimensional fueran exactamente de seis lados, la unión de tres bordes de grano se producirá en una unión triple de ángulos diédricos de 120° exactos. Además de eso, todos los lados de los granos serán rectos (radio de curvatura tendiendo a infinito). Si en esta estructura de granos hexagonales fuese introducido un grano con cinco lados, sería geoméricamente necesaria la introducción de un grano de siete lados ¹⁵. En este caso, ninguno de los dos granos tendrá contornos rectos para ajustarse al ángulo de equilibrio de 120° . De esto se concluye que los granos con menos de seis lados tendrán sus caras convexas mientras que los de más de seis lados tendrán sus caras cóncavas (Fig. 1.2) y que los granos con menos de seis lados tenderán a disminuir y desaparecer mientras que los de más de seis lados tenderán a crecer. La existencia de una curvatura en los bordes indica, por lo tanto, que puede ocurrir el crecimiento de grano. Es de esta manera como Smith ¹⁴ concluyó que el crecimiento de grano es inevitable o, conforme a Burke ⁸, autoperpetuante.

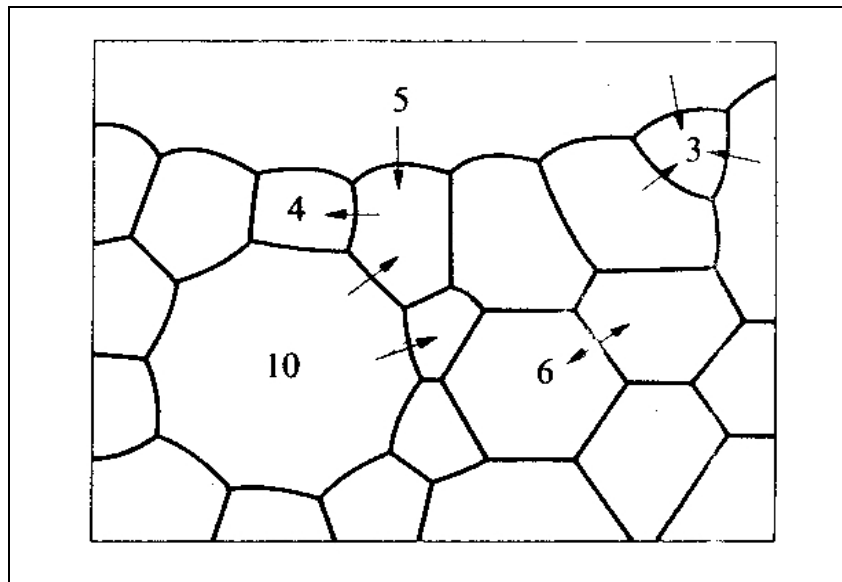


Figura 1.2: Granos con distinto número de lados. Las flechas indican la dirección de movimiento. (After Coble and Burke 1963, courtesy of Prog.Ceramic Sci)

La consideración meramente mecánica para que una superficie curvada de un borde de grano esté en equilibrio, requiere que las fuerzas que actúan sobre ella se deban anular, es decir, que debe existir una presión del lado opuesto para balancear dichas fuerzas superficiales. Esta presión representa el potencial termodinámico para el crecimiento de grano. Llamándola ΔP , se tiene:

$$\Delta P = 2\gamma / \rho \quad [1.4]$$

donde: ΔP : potencial termodinámico para el crecimiento de grano

γ : energía libre de superficie de borde

ρ : radio de curvatura

De esta ecuación atribuida a Gibbs-Thomson ¹⁵, se puede concluir que:

- La curvatura de los bordes de grano promueve la migración preferencial de átomos de un lado para otro del contorno
- Los átomos del lado cóncavo del borde se mueven preferencialmente hacia el lado convexo.

De esa forma, los bordes se mueven en el sentido de su centro de curvatura ⁸ hasta que formen un arreglo estable en el cual no exista tendencia para su migración. Tal situación debe ser aquella en que el radio de curvatura tiende al infinito, o sea, cuando los contornos se vuelven rectos.

De la misma forma que existe una estructura de equilibrio en dos dimensiones, también hay una en tres dimensiones: la estructura de tetracaidecaedros de Kelvin ¹⁶. El tetracaidecaedro es un poliedro formado por catorce caras, siendo ocho de las mismas hexágonos y seis cuadrados.

De modo análogo a una estructura de hexágonos, una estructura de granos con forma de tetracaidecaedro también es difícil de encontrar ¹⁵. La misma inestabilidad existente para un arreglo bidimensional, vale para una arreglo tridimensional.

1.2. MECANISMOS DE MIGRACIÓN DE LOS BORDES DE GRANO

Históricamente, se han utilizado dos caminos para estudiar los mecanismos que llevan al crecimiento de grano. Un camino está relacionado con los mecanismos de migración de bordes de grano a escala atómica (mecanismo atomístico), y el otro está relacionado con los aspectos físicos y topológicos de una estructura de granos (mecanismo no-atomístico). Las dos visiones no son totalmente separadas, sino por el contrario, los dos planteos se pueden unir.

Las teorías cinéticas de crecimiento de grano se pueden resumir ¹⁷ como:

$$V = M \Delta P \quad [1.5]$$

donde: V: velocidad de migración de los bordes de grano

M: movilidad del contorno granular, definido como la variación de la velocidad de migración con el potencial termodinámico

ΔP : potencial termodinámico para el crecimiento de grano

Los principales factores que influyen en la movilidad de los bordes de grano son la diferencia de orientación entre los granos ¹⁸, la presencia de átomos soluto (o impurezas) ¹⁹, la presencia de partículas de segunda fase y la temperatura ²⁰.

1.2.1. Mecanismo atomístico

Burke ⁸, utilizando la teoría de los complejos activados ²¹, mostró que la velocidad de migración de un borde de grano está dada por:

$$V = \frac{kT}{h} \lambda \exp(-\Delta G_a/RT) \Delta P/RT \quad [1.5a]$$

donde: kT/h : frecuencia de "saltos" de los átomos

k: constante de Boltzmann

T: temperatura absoluta

h: constante de Planck

R: constante general de los gases

λ : espaciamiento interatómico en el borde de grano

ΔG_a : energía libre de Gibbs de activación para la migración de los átomos

La ecuación anterior se corresponde con la ecuación [1.5] si:

$$M = \frac{k}{hR} \lambda \exp(-\Delta G_a/RT) \quad [1.6]$$

En esta teoría se admite que entre dos granos vecinos, uno de ellos posee átomos arreglados de tal forma que poseen una energía libre inferior a la del arreglo de átomos del otro grano. De esa forma, el flujo neto de átomos que migran a través del borde de grano será en dirección al de menor energía libre. Como consecuencia, el contorno migrará en la dirección al primer grano.

1.2.2. Mecanismo no-atomístico

Se puede seguir el crecimiento granular a partir de las diversas variaciones que ocurren cuando una estructura de burbujas de jabón exhibe crecimiento ¹⁸. En cuanto a la configuración, una

estructura de burbujas de jabón es análoga a una estructura granular en metales. Físicamente, existen algunas diferencias ya que la energía libre de superficie de los bordes de grano metálicos puede variar ²² mientras que esta energía en el caso de la burbujas de jabón, es constante.

Si una de esas células (burbujas) posee tres lados, puede desaparecer simétricamente, con la extensión de los contornos adyacentes, sin perturbarlos (Fig. 1.3). Entre tanto, si la célula tiene más de tres lados, es posible que durante el crecimiento de las burbujas exista una situación en la cual se encuentren cuatro lados en un mismo vértice. Tal condición inestable será seguida de un rearrreglo de forma de obtener dos vértices y un nuevo contorno que ahora pertenece a otras dos células vecinas ¹². Así, teniendo en cuenta las diferencias entre una estructura de burbujas de jabón y una de granos metálicos, el mecanismo de migración de éstos últimos debe ser análogo.

Basándose en consideraciones topológicas, Smith ¹⁸ propuso que la velocidad de migración de los bordes de grano debe aumentar de forma inversamente proporcional a los radios de curvatura de los granos. Se puede verificar que esa hipótesis está de acuerdo con la ecuación 1.4 combinada con la ecuación 1.5.

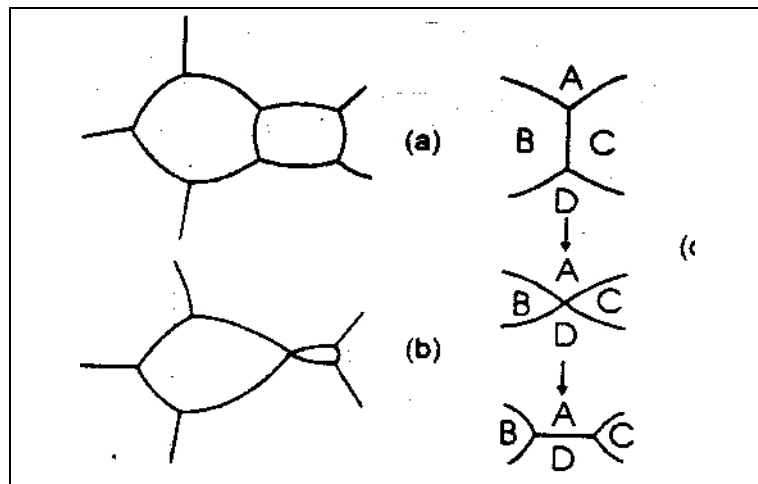


Figura 1.3: Variación de la configuración granular durante el crecimiento de grano.

Por otra parte, Beck ²² definió una ley empírica de crecimiento de grano en condiciones isotérmicas, expresada como:

$$D = Kt^n \quad [1.7]$$

donde: D: diámetro (tamaño) medio de grano después del tiempo t de tratamiento

K y n : parámetros que son constantes durante el crecimiento de grano isotérmico y que varían conforme a la temperatura escogida y al tipo de material.

El exponente n equivale al valor de la pendiente de la parte recta en un gráfico $\log D$ vs $\log t$. En este mismo trabajo Beck mostró que la velocidad de crecimiento de grano es proporcional al área (total) del borde de grano y por lo tanto, debería ser una función inversa del tamaño de este. Tal función es del tipo ²³:

$$dD/dt = K/D \quad [1.8]$$

Integrando y admitiendo que para $t=0$, $D=D_0$, donde D_0 es el tamaño de grano inicial:

$$D^2 - D_0^2 = K t \quad [1.9]$$

conocida como ley parabólica de crecimiento de grano ¹⁹. Suponiendo que el crecimiento sea tal que $D \gg D_0$, entonces:

$$D = K t^{0.5} = K t^n \quad [1.10]$$

A pesar de que Burke ²⁷ mostró que $n=0,5$, tal valor no se encuentra experimentalmente.

El hecho de que el exponente n sea diferente del valor 0,5 (siempre menor a este valor) se atribuye a la presencia de átomos de impurezas ²⁴ o a la existencia de alguna especie de inhibición del crecimiento de grano.

HU ²⁸, propuso la siguiente ecuación como alternativa a la ecuación 1.5, para expresar la velocidad de migración de los contornos de grano:

$$V = M \Delta P^m \quad [1.11]$$

que es análoga a la ecuación 1.5 haciendo $m=1$. La relación entre los coeficientes m y n se puede expresar por:

$$m = 1/n - 1 \quad [1.12]$$

De esa forma, el valor de $n=0,5$ equivaldría a una ley de crecimiento parabólico y a una dependencia lineal de la velocidad de migración de bordes de grano con el potencial

termodinámico solamente cuando se tiene $m=1$. Se ha verificado²⁸ que la ecuación 1.11 es lineal solamente a altas temperaturas.

Tanto la variación de los valores de m como los de n permiten mostrar el efecto de restricción por impurezas en la migración de los contornos.

Grey y Higgins⁵⁰, proponen que la relación empírica entre V y ΔP está dada por la relación

$$V = \lambda^{-1} (\Delta P - \mu) \quad [1.13]$$

donde λ^{-1} es el recíproco de la movilidad del borde de grano y μ es una fuerza de frenado que actúa como una resistencia intrínseca. Asumiendo, que la fuerza impulsora ΔP , para el crecimiento de grano, es inversamente proporcional al tamaño medio de grano D , y que la velocidad de migración de los bordes de grano V , es directamente proporcional a la velocidad de crecimiento de grano dD/dt , la ecuación [1.13] puede escribirse como:

$$\frac{dD}{dt} = \lambda^{-1} (D^{-1} - \mu) \quad [1.14]$$

e integrando se tiene:

$$t = \frac{\lambda}{\mu^2} \left(\ln \frac{1 - D\mu}{1 - D_0\mu} \right) + \mu (D - D_0) \quad [1.15]$$

donde t es el tiempo de tratamiento térmico a temperatura constante (envejecido isotérmico) y D_0 es el tamaño medio de grano a tiempo $t=0$.

Según Grey y Higgins⁵⁰, el origen físico de esta resistencia intrínseca al crecimiento de grano, indicada por el término μ , pueden estar dado por grupos de átomos de solutos (*clusters*) asociados con dislocaciones, que no pueden seguir fácilmente la migración del borde de grano y que actúan como partículas de segunda fase.

En el fenómeno de crecimiento de grano, se pueden discriminar dos tipos de mecanismos: uno caracterizado por una variación continua del tamaño medio de grano (crecimiento normal), y otro caracterizado por una variación discontinua del tamaño medio de grano, donde unos pocos granos extremadamente grandes aparecen en una estructura de granos finos (crecimiento anormal).

El crecimiento normal de granos ha sido estudiado en mayor extensión que el crecimiento anormal de granos ^{25,26}.

1.3. CRECIMIENTO NORMAL DE GRANO

Los cuatro principales atributos que permiten caracterizar el crecimiento normal de grano son ²⁷:

Uniformidad: a lo largo del proceso de crecimiento de grano, los granos están encuadrados dentro de una banda relativamente estrecha de tamaños, con un coeficiente de variación alrededor de 0,4 y constante ²⁸, lo cual produce una estructura final de apariencia uniforme.

Escala: durante el crecimiento de grano, después de suficiente tiempo, la distribución de tamaños de grano permanece similar ³¹, mientras que el tamaño medio de grano aumenta.

Estabilidad: perturbaciones en el proceso de crecimiento normal de grano no afectan la estructura final y la dinámica ³¹, que son también insensibles a las condiciones iniciales.

Log-normalidad: tanto el perfil ²¹ como los tamaños de grano, se pueden representar por una distribución teórica log-normal ^{9,17,28}.

1.4. CRECIMIENTO ANORMAL DE GRANO

El crecimiento de grano anormal consiste en la migración de algunos pocos bordes de algunos granos, llevando a una estructura que contiene pocos granos extremadamente grandes, en medio de una estructura de granos finos. A este tipo de crecimiento se le han dado diferentes nombres. Algunos ejemplos son: crecimiento discontinuo de grano ²⁹, crecimiento exagerado de grano ³⁰, germinación ¹¹, crecimiento selectivo de grano ³¹, recristalización secundaria ³², crecimiento rápido de grano ³³, crecimiento hipercanibalístico de grano ³⁴, crecimiento preferencial de grano ³⁵, engrosamiento de grano ³⁶, crecimiento anormal de grano ³⁷.

El crecimiento anormal de grano está caracterizado por una distribución de tamaños de grano inicialmente unimodal, el cual se torna bimodal durante el proceso y vuelve a ser una distribución unimodal en su etapa final. En este sentido, se afirma ¹⁶ que el crecimiento anormal funciona como un régimen transitorio del crecimiento normal de granos.

De manera general, los factores que determinan la ocurrencia de crecimiento anormal de grano son la inhibición del crecimiento normal de grano, sumado a algún factor que vuelva a unos

pocos bordes de grano capaces de migrar mientras que los demás puedan permanecer impedidos de migrar.

1.5. INHIBICIÓN DEL CRECIMIENTO NORMAL DE GRANO

La inhibición del crecimiento normal de grano es uno de los factores que determinan la aparición de crecimiento anormal de granos. Tal inhibición lleva a un tamaño de grano constante, usualmente llamado tamaño de grano límite ³⁸.

El aumento del tamaño de grano necesariamente involucra la disminución del área de borde de grano por unidad de volumen y, por lo tanto, la correspondiente disminución de la energía superficial del borde de grano por unidad de volumen. Como esta última se relaciona con el potencial termodinámico para el crecimiento de grano, se sigue que, al aumentar el tamaño de grano por crecimiento de grano, automáticamente se reduce el potencial termodinámico para el crecimiento posterior. La velocidad de crecimiento de grano, (ecuación 1.5), disminuye y se vuelve efectivamente cero cuando el área de borde de grano es suficientemente extensa ³⁹. Tal limitación al crecimiento deriva de la propia naturaleza de la cinética de crecimiento de grano del material.

Existen cuatro formas conocidas de inhibir el crecimiento normal de grano. En todas, puede ocurrir crecimiento anormal cuando se suma algún otro factor que promueve el movimiento de algunos pocos contornos con relación a los demás. Las cuatro formas conocidas de inhibición del crecimiento normal de granos son debidas a los átomos soluto ⁴⁰, espesor de la muestra ⁴¹, orientación preferencial ⁴² y partículas de segunda fase ³².

La influencia de átomos soluto se puede entender por el análisis de la distribución de soluto próxima al borde en migración. Cuando un contorno se encuentra en una posición estacionaria, la disposición de átomos soluto es simétrica a la línea central del borde de grano, pero cuando éste se mueve, la distribución se vuelve asimétrica ⁴⁴. El número de átomos soluto asimétricamente dispuestos es un factor que determina la restricción al movimiento de los bordes de grano; cuando más asimétrica es la distribución, mayor es el efecto restrictivo. Tal comportamiento es denominado de "baja velocidad" ⁴³, y es típico del crecimiento de grano.

En muestras de espesor reducido, el crecimiento de grano ocurre hasta el instante en que el tamaño de grano alcanza el espesor de la muestra. En esta situación, el equilibrio energético entre el borde de grano y la superficie libre produce un surco térmico (groove). De esta forma, el borde de grano queda prácticamente inmóvil, ya que la posibilidad de movimiento de éste llevaría a una condición de mayor energía.

Otra forma de inhibición del crecimiento normal de granos es debido a una orientación preferencial (textura) poco pronunciada. En este caso, los contornos entre los diversos granos poseen, en la mayor parte, una movilidad y una energía libre de superficie relativamente bajas, porque las diferencias de orientación entre los granos son relativamente pequeñas. Tales valores tornan la migración de los bordes de grano extremadamente lenta, provocando la inhibición del crecimiento normal de grano ⁴⁶.

La inhibición por partícula de segunda fase presupone que cuando una partícula se encuentra en el contorno de grano (Fig. 1.4), 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 ⁴³ a Smith se tiene una relación matemática entre el tamaño de grano límite y el tamaño de las partículas de segunda fase:

$$R = 4r / 3f \quad [1.16]$$

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 1.16 ^{44,45,46}. Esto es porque la relación obtenida parte de la hipótesis de que el radio del grano, R, es aproximadamente igual al radio de curvatura del borde, ρ, de la ecuación 1.4. Sin embargo tal hipótesis no es verdadera. Procurando corregir este problema, actualmente se utiliza la siguiente relación ^{47,48}:

$$D = 4r / 3f \quad [1.17]$$

donde: D: diámetro medio (tamaño medio) de grano.

Esta puede ser llamada la ecuación modificada de Zener-Smith para la inhibición del crecimiento normal de grano.

En una estructura de granos impedidos de crecer por partículas de segunda fase, es posible obtener el crecimiento anormal de grano a través del crecimiento competitivo o la disolución de

las partículas de segunda fase en determinadas regiones, de tal forma que los bordes de grano allí localizados sean capaces de migrar, mientras que los demás permanecen inhibidos de crecer 32 .

Desde el punto de vista magnético, el incremento del tamaño de grano aumenta el tamaño de dominio magnético resultando en una disminución en las pérdidas por histéresis. La razón de eso es la menor cantidad de paredes de dominios a movilizar.

Sin embargo si los dominios crecen por encima de un valor óptimo, las pérdidas se incrementan nuevamente, básicamente a nivel de la componente anómala, puesto que las paredes deben moverse más rápido para cubrir la misma distancia.

Como se vio, el tamaño de grano final depende de muchos factores que incluyen la historia termomecánica y la morfología de las inclusiones y precipitados. Los elementos formadores de inclusiones/precipitados, esto es C, Mn y Al, presentes en el acero, pueden afectar el tamaño de grano final inhibiendo el crecimiento. Los precipitados mayores que un tamaño crítico no anclan los bordes

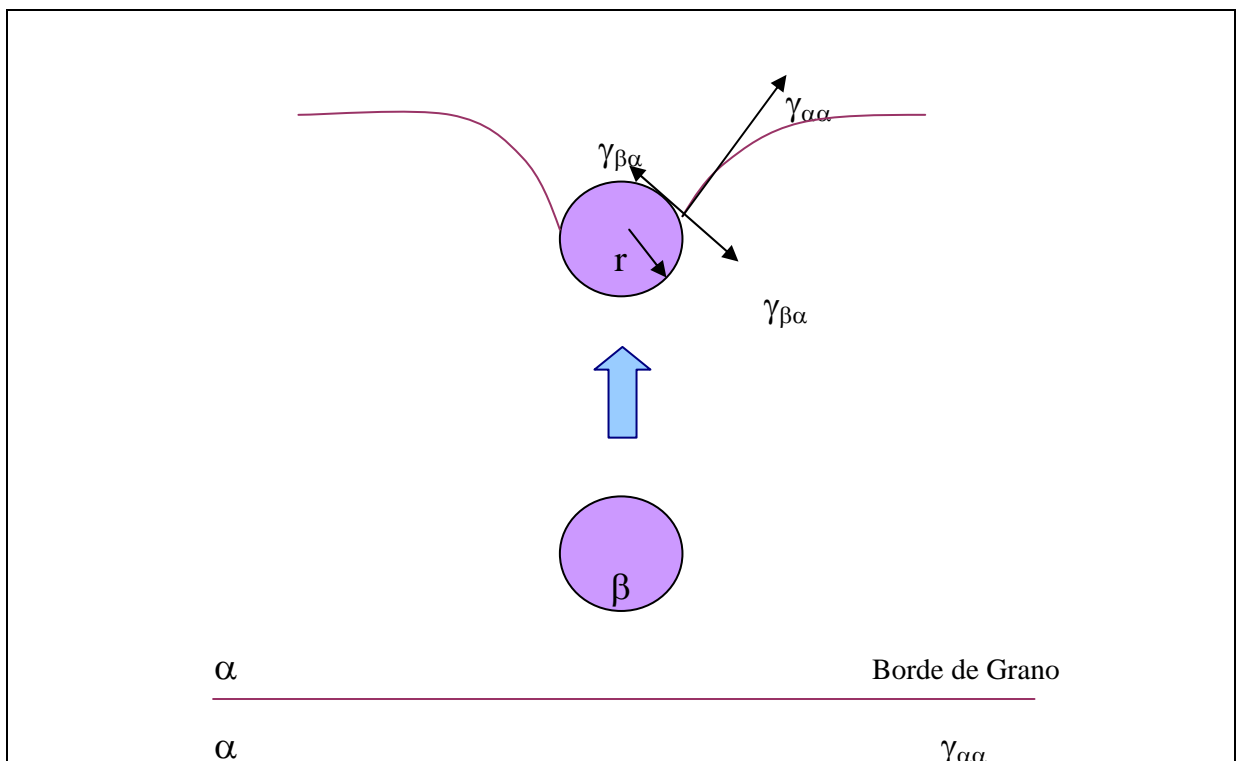


Figura 1.4: Interacción entre un borde de grano y una partícula esférica. (J.W.Martín *Micromechanisms, in particle-hardened alloys*)

de grano mientras que pequeñas inclusiones, particularmente aquellas comprendidas entre 0,01 y 0,10 μm , deben ser evitadas debido a que frenan el movimiento de las paredes de los dominios durante el proceso de magnetización ⁴⁹.

REFERENCIAS CAPÍTULO I

-
- ¹ Ewing J.A., Rosenhain W.; Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 193, 353-372 (1900)
- ² Ewing J.A., Rosenhain W.; Philosophical Transactions of the Royal Society, Vol. 65, 85-90 (1899)
- ³ Ewing J.A., Rosenhain W.; Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 195, 279-301 (1900)
- ⁴ Burke J.E., Turnbull D.; *Recrystallization and Grain Growth*, London Pergamon Press. Ltd., 220-292 (1990)
- ⁵ Beck, P.A.; A Quarterly Supplement of the Philosophical Magazine, Vol.3, N° 11, 245-324 (1954)
- ⁶ Pande C.S.; Acta Metallurgica, Vol.35, N° 11, 2671-2678 (1987)
- ⁷ Jeffries Z., Archer R.S.; *The Science of Metals*, London, McGraw Hill Book Co.Inc. (1924)
- ⁸ Smith C.S.; *A Search for Structure*, Cambridge, MIT Press, 1-32 (1981)
- ⁹ McLean D.; *Grain Boundaries in Metals*, Oxford University Press, 231-255 (1957)
- ¹⁰ Verhoeven J.D.; *Fundamentals of Physical Metallurgy*, John Wiley & Sons Inc., 169-215 (1975)
- ¹¹ Hu H.; USA-China Bilateral Conference, The Metallurgical Society of AIME, 385-407 (1981)
- ¹² Pande C.S., Marsh S.P.; J.of Metals 25-29 Set. (1992)
- ¹³ Feltham P.; Acta Metallurgica, Vol.5, N°2, 97-105 (1957)
- ¹⁴ Smith C.S.; *Metal Interfaces*, Ohio, American Society of Metals, 65-113 (1951)
- ¹⁵ Shewmon P.G.; *Transformations in Metals*, McGraw Hill Inc. 69-137 (1969)
- ¹⁶ Kelvin L.; Proceedings of the Royal Society, Vol.55, 1-16 (1894)
- ¹⁷ Higgins G.T.; Metal Science Vol.8, 143-150 (1974)
- ¹⁸ Gleiter H., Chalmers B.; *High Angle Grain Boundaries*, Pergamon Press, Oxford, 13-42 (1973)
- ¹⁹ Aust K.T., Rutter J.W.; Transaction AIME, Vol.215, 119-127 (1959)
- ²⁰ Porter D.A., Easterling K.E.; *Phase Transformations in Metals and Alloys*, Van Nostrand Reinhold, Berkshire (UK) (1981)
- ²¹ Christian J.W.; *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*, Pergamon Press, Oxford, 80-94 (1965)
- ²² Beck P.A.; Transaction AIME, Vol.175, 372-398, Oct. (1947)
- ²³ Burke J.E.; Transaction AIME, Vol.175, 399-400, Oct. (1947)
- ²⁴ Hu H.; Canadian Metallurgical Quaterly, Vol.13, N°1, 275-286 (1974)
- ²⁵ Martinez L.; J.of Metals 15, Set. (1992)
- ²⁶ Dutra J.C.; "*Crescimento anrmal de graos en aços para cementação*" tesis de Maestria, Escuela Politécnica de la Universidad de San Pablo, San Pablo, Brasil, (1994)
- ²⁷ Kurtz S.K., Carpay F.M.A.; J.of Appl. Physics, Vol.51, N°11, 5725-5744 (1980)
- ²⁸ Matsuura K., Itoh Y.; ISIJ International, Vol.31, N°4, 366-371 (1991)
- ²⁹ Beck P.A., Holzworth M.L., Sperry P.R.; Transaction AIME, Vol.180, 163-192, Oct. (1948)
- ³⁰ Dunn C.G.; Metals Transactions, Vol.185, 881-886, Nov. (1949)
- ³¹ Abbruzzese G., Fortunati S.; J. of Appl. Physics, Vol.10-II, N°64, 5344-5346 (1988)
- ³² Hassner F.; *Secondary Recrystallization*, Stuttgart, Dr.Riederer Verlag GmbH, 97-109 (1978)
- ³³ Howe H.M., Hills B.; Transaction AIME, Vol.56, 582-599 (1917)
- ³⁴ Gladman T.; Proceedings of the Royal Soc., Vol.194^a, 298-309, Mar. (1966)
- ³⁵ Kim G., Kwon O.; Thermec-88, Chiyoda-ku, Tokyo, ISIJ, Vol.1, 30-38 (1988)
- ³⁶ Gladman T., Pickering F.B.; Journal of the Iron and Steel Institute, 653-664 Jun (1967)
- ³⁷ Tweed C.J., Hansen N., Ralph B.; Metallurgical Transaction, Vol. 14^a, 2235-2243 Nov. (1983)
- ³⁸ Burke J.E.; Transaction AIME, Vol. 180, 73-91, Feb. (1949)
- ³⁹ Cotteril P., Mould P.R.; *Recrystallization and Grain Growth in Metals*, Halsted Press, John Wiley & Sons, Ney York (1976)

-
- ⁴⁰ Higgins G.T.; *Metal Science*, Vol. 8, 143-150 (1974)
- ⁴¹ Mullins W.W.; *Acta Metallurgica*, Vol. 6, N°6, 414-427 (1958)
- ⁴² Beck P.A., Sperry P.R.; *Metals Transactions*, Vol. 185, 240-241, Mar. (1949)
- ⁴³ Smith C.S.; *Transaction AIME*, Vol. 175, N° 2, 15-51 (1948)
- ⁴⁴ Nes E., Ryum N., Hunder O.; *Acta Metallurgica*, Vol. 33, N° 1, 11-22, (1985)
- ⁴⁵ Kaspar R., Mahmoud N.; *Materials Science and Technology*, Vol. 7, 249-254, Mar. (1991)
- ⁴⁶ Zhengfung Q.; *Transactions of the Metals Heat Treatment*, Vol. 2, N° 6, 9-19 (1985)
- ⁴⁷ Hillert M.; *Thermec-88*, Tokyo. The Iron and Steel Institute of Japan, Vol. 1, 30-38 (1988)
- ⁴⁸ Cuddy L.J., Raley J.C.; *Metallurgical Transactions A*, Vol. 14A, 1989-1995, Oct. (1983)
- ⁴⁹ Lyudkowsky G., Southwick P.D.; *Met.Trans.A*, Vol.17A, 1267 (1986)
- ⁵⁰ Grey E.A., Higgins G.T.; *Scripta Metallurgica*, Vol. 6, 253-258, (1972)

CAPÍTULO II

METODO DE MONTE CARLO

2.1. EL MÉTODO MONTE CARLO

El método de Monte Carlo (MC), es una metodología estadística, la cual usa números aleatorios para elegir una muestra representativa de un conjunto extremadamente grande de posibles eventos. De hecho, la técnica proporciona un medio para evaluar integrales multidimensionales que no se pueden resolver por procedimientos analíticos estándares.

El método es muy práctico cuando se consideran sistemas con un gran número de grados de libertad; esta es una situación típica para la simulación numérica de crecimiento de grano de una muestra policristalina.

El nombre Monte Carlo, presuntamente se refiere al muestreo aleatorio del giro de una ruleta perfecta, y aparentemente fue acuñado por primera vez por Metrópolis y Ulam¹.

Las configuraciones de partículas no son seguidas en el tiempo mediante una simulación de MC, porque éstas, son generadas aleatoriamente de acuerdo a un conjunto de reglas preestablecidas. Por lo tanto, en una simulación, el procedimiento de la generación de números aleatorios, es usado para producir eventos estocásticos de las partículas, a partir de los cuales podemos derivar propiedades efectivas (promedios temporales) del sistema que esta siendo simulado. Estas propiedades estructurales o termodinámicas son obtenidas por promedio sobre un gran número de configuraciones representativas típicas, de la condición de equilibrio.

Para la implementación de la técnica de MC se usa comúnmente el denominado algoritmo de Metrópolis². Este algoritmo genera específicamente, una secuencia de posiciones de partículas, que están distribuidas respondiendo a la distribución de Boltzmann. Existe una restricción necesaria en la posición de las partículas, porque en equilibrio, la probabilidad de que un sistema este en un estado s de energía $U(s)$ es proporcional al factor de Boltzmann. Así tenemos:

$$\exp(-U(s)/kT) \quad (2.1)$$

donde T es la temperatura absoluta y k la constante de Boltzmann.

De acuerdo a la teoría ergódica, el tiempo que un sistema permanece en un estado s , es proporcional a la ec. (2.1).

Si el sistema es observado a un tiempo arbitrario, el valor de expectación $\langle f \rangle$ para cualquier propiedad f del sistema que tenga un valor instantáneo $f(s)$ para el estado s es:

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(s) \exp(-U(s)/kT) ds}{\int \exp(-U(s)/kT) ds} \quad (2.2)$$

La evaluación de las integrales de la ecuación [2.2] se vuelven ineficientes si se utilizan técnicas numéricas convencionales, debido al término exponencial, el cual significa que la mayor contribución a la integral proviene de una pequeña proporción de las configuraciones generadas.

Debido a esto, debemos tener en cuenta la importancia del muestreo, y generar las configuraciones con densidad de probabilidad

$$P(s) = \frac{\exp(-U(s)/kT)}{\int \exp(-U(s)/kT) ds} \quad (2.3)$$

El método de Metrópolis usa la teoría de cadenas Markov. Una cadena de Markov es una sucesión al azar de estados $s_1, s_2, s_3, \dots, s_n, s_{n+1}, \dots$ en la cual cada estado s_{n+1} depende solamente del estado anterior s_n y no de los estados anteriores s_{n-1}, \dots, s_2, s_1 . En la práctica, se considera un sistema de partículas en el estado s_n a partir del cual se genera el estado s_{n+1} mediante la elección de una partícula al azar j , la cual sufre un evento con probabilidad uniforme, respecto a cualquier punto en una pequeña región alrededor de la partícula j .

La implementación del muestreo en la simulación de MC es una herramienta muy importante. Supongamos que una partícula j elegida al azar en el estado s_n sufre un evento tal, que la energía total cambia de U_{vieja} a U_{nueva} . La aceptación o no del evento, depende de la magnitud del cambio de energía $\Delta U = U_{nueva} - U_{vieja}$.

Luego existen dos alternativas a considerar:

- i) si $\Delta U \leq 0$ el evento es aceptado incondicionalmente
- ii) si $\Delta U > 0$ el evento es aceptado pero con una probabilidad p tal que

$$p = \frac{P(s_{n+1})}{P(s_n)} = \exp(-\Delta U / kT) \quad (2.4)$$

en la situación (ii) la posición de la partícula j en la nueva configuración, es decidida por comparación del valor de p con un número ξ generado al azar con distribución uniforme en el intervalo (0,1).

Si $p \leq \xi$ el evento es aceptado, si $p > \xi$ el evento es rechazado.

2.2. EL MÉTODO MONTE CARLO APLICADO AL CRECIMIENTO DE GRANO

Tradicionalmente el estudio del crecimiento de grano se ha hecho mediante el análisis y comparación cuantitativa de micrografías. Recientemente, con el desarrollo del poder de procesamiento de las computadoras, surge una nueva posibilidad: la simulación del crecimiento de grano.

La evolución microestructural durante el crecimiento de grano, ocurre por migración del borde de grano en respuesta a varias fuerzas impulsoras. Para describir este fenómeno, el modelo de simulación debe incluir descripciones adecuadas tanto de la movilidad del borde de grano como de las fuerzas impulsoras del movimiento. En todos los casos, los parámetros que describen esto son anisotrópicos.

La simulación Monte Carlo es un proceso estocástico que genera una secuencia de configuraciones de estado de sitios de red, los estados de prueba se generan al azar y son aceptados o rechazados con una probabilidad dada por el factor de Boltzmann.

Srolovitz et al. ³ en 1983 fueron los primeros que propusieron la posibilidad de modelar y simular el crecimiento de grano utilizando el método Monte Carlo. Estos mismos autores, en 1984 ^{4,5}, publicaron estudios sobre diversas variables del método, entre las que se encontraban:

- el número de orientaciones máximas para la simulación
- la distribución de los tamaños de grano
- el tipo de matriz posible para la simulación.

Posteriormente Radhakrishnan y Zacharia ⁶ propusieron un nuevo concepto en el algoritmo utilizado por Srolovitz, al que llamaron "autómata celular".

Actualmente son muchos los investigadores que utilizan el método Monte Carlo para la simulación del crecimiento de grano en diferentes sistemas. Entre otros podemos mencionar a: Mehnert ⁷, Jiang et al. ⁸, Blikstein ⁹, Szpunar ^{10,11}, Holm ¹², Humphreys ¹³, Abbruzzese ¹⁴ y Liu ¹⁵.

2.2.1. Modelo de Srolovitz

La idea básica del método Monte Carlo para simular el crecimiento de grano, se basa en la termodinámica de las interacciones atómicas.

El primer paso consiste en representar la muestra como una matriz bidimensional ($N \times N$) o tridimensional ($N \times N \times N$), en donde cada elemento de área (volumen) está representado por un valor entero (Q_i) que indica su hipotética orientación cristalográfica o spin del microcristal. Porciones contiguas de la matriz con un mismo valor constituyen un grano (**Figura 2.1**). Naturalmente, un borde de grano vive entre dos sitios de red vecinos con diferentes orientaciones.

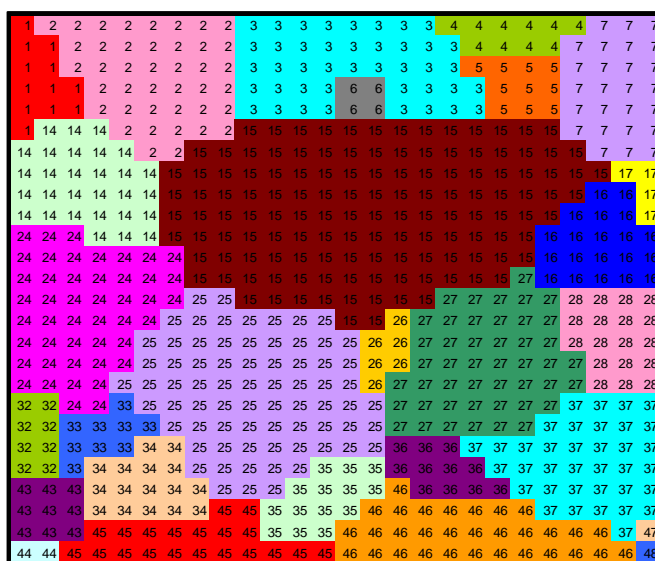


Figura 2.1: La estructura de granos representada en una matriz cuadrada en 2D

Una primera forma de discretización es la división cuadrada o cúbica de la matriz. Cada elemento tendrá, por lo tanto, un conjunto de coordenadas (x,y) o (x,y,z) .

Escogida y preparada la matriz, se realiza la simulación propiamente dicha, la que consiste en cuatro etapas:

1. cálculo de la energía libre de cada "átomo" (U_i) con su orientación cristalográfica actual (Q_i)
2. atribución aleatoria de una nueva orientación del "átomo o micro cristal"
3. cálculo de la nueva energía libre del "átomo" (U_f) con la nueva orientación (Q_f)
4. comparación de los valores de energía libre ($U_f - U_i$). Prevalece la orientación (Q_i o Q_f) que minimiza la energía.

Estas cuatro etapas son repetidas millones de veces en posiciones aleatorias del retículo cristalino. Se tiene como resultado general una simulación microscópica del descenso de energía libre del sistema, lo que es la fuerza impulsora del crecimiento de grano.

Es interesante notar que el principio de la simulación es la termodinámica del arreglo atómico o de micro cristales: no se utiliza ninguna otra interferencia teórica o experimental, o sea, no se parte de leyes matemáticas de crecimiento.

El cálculo de la energía libre se realiza mediante el uso del *Hamiltoniano*, que describe la interacción entre vecinos más próximos:

$$H = -J \sum_{i,j} (\delta_{S_i S_j} - 1) \quad (2.5)$$

donde J es una constante positiva específica que mide la interacción del sitio de red con los sitios vecinos, S_i es una de las Q_i orientaciones posibles del elemento i de la matriz y $\delta_{S_i S_j}$ es el delta de Kronecker, que vale 1 cuando lo que se compara (el vecino) es igual y 0 cuando es diferente (**Figura 2.2**). La suma se realiza sobre los n primeros vecinos, donde n es igual a 8 para una red cuadrada.

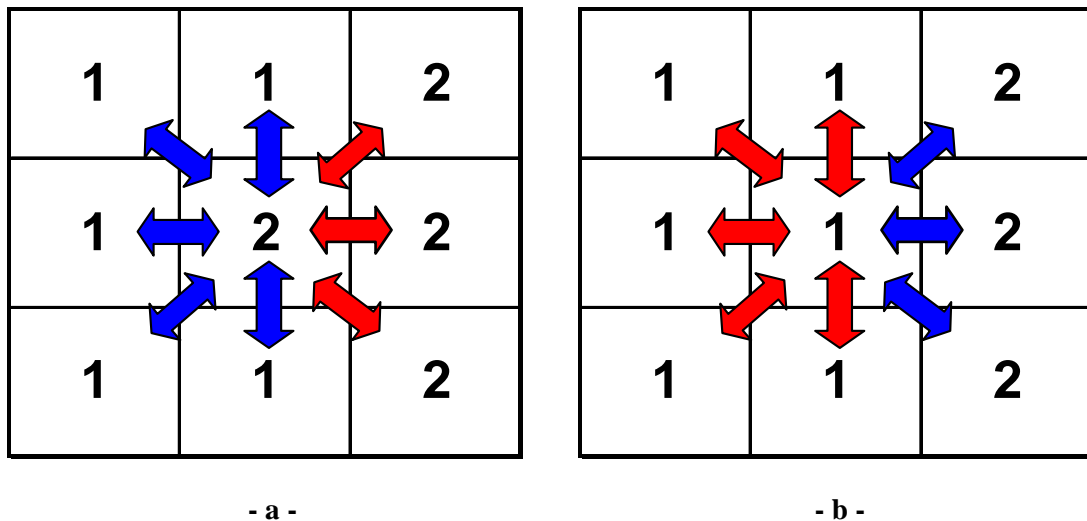


Figura 2.2: Cálculo de la energía libre de un elemento de la matriz ($Q_i = 2$).
a- En este ejemplo, $G_i=5$ (cinco vecinos cercanos diferentes)
b- Luego de un intento de reorientación a $Q_f=1$, la energía libre se reduce a $G_f=3$, y por lo tanto, la nueva orientación será mantenida.

2.2.2. Algoritmo de Radhakrishnan

Aunque el algoritmo describe bien el fenómeno físico, algunos autores vieron que se podía producir la nucleación "artificial" de granos dentro de otros, lo que no ocurre experimentalmente. En 1996 Radhakrishnan y Zacharia ⁵ propusieron un nuevo algoritmo que eliminaba algunas de las distorsiones detectadas del método y aceleraba la ejecución computacional.

En este nuevo algoritmo se propone que la nueva orientación a ser "evaluada" en cada elemento de la matriz, no sea elegida de todas las otras posibles (Q-1), sino que se debe elegir sólo entre las de los vecinos próximos al elemento considerado.

El trabajo de este nuevo algoritmo sigue los siguientes pasos:

1. Se selecciona al azar la coordenada de un sitio de red
2. Se intercambia el valor de la orientación del sitio seleccionado por el valor de la de uno de sus vecinos elegido al azar
3. Se evalúa el cambio total de la energía asociada con el intercambio, el cual se calcula con la ecuación [2.5] antes y después del mismo
4. La posibilidad de transición de orientaciones se realiza con una probabilidad p que está dada por:

$$p = \begin{cases} \exp(-\Delta U / k_b T) & \text{si } \Delta U > 0 \\ 1 & \text{si } \Delta U \leq 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

donde: ΔU es la alteración de la energía ocasionada por el cambio de orientación ($\Delta U = \Delta H$), k_b es la constante de Boltzmann y T es la temperatura.

5. Se genera un número aleatorio ξ en el intervalo $0 \leq \xi < 1$
6. Se toma la decisión de intercambio el cual es aceptado si ξ es menor o igual que la probabilidad de intercambio calculada por Metrópolis ¹⁶, p . Para otro caso el intercambio se desecha y la configuración inicial permanece inalterada.

La unidad de tiempo de simulación se define como 1 paso Monte Carlo (MCS) por sitio de red, el cual corresponde a $N \times N$ micro ensayos de reorientación, donde $N \times N$ es el número total de sitios de red.

2.2.3. Modelo de Mehnert para la incorporación de la textura

En las condiciones reales, la cinética del crecimiento de grano está fuertemente influenciada por la evolución de la textura, las partículas de segunda fase (anclaje de Zener) y el frenado por soluto. Tanto la energía de borde de grano como la movilidad del borde están afectadas por la desorientación entre granos vecinos ⁶.

Los valores de energía y movilidad son anisotrópicos. Esta anisotropía proviene de la dependencia que tiene la estructura del borde de grano con la bi-cristalinidad y con los factores cristalográficos asociados con la fuerza impulsora. Así, todos los modelos del fenómeno de crecimiento de grano requieren de la parametrización de la movilidad del borde y de su energía.

El problema no es trivial ya que la velocidad de movimiento del borde de grano se puede expresar como:

$$V = M \cdot F = M \cdot \gamma \cdot \kappa \quad (2.7)$$

donde M es la movilidad del borde, F es la fuerza impulsora del movimiento, γ es la energía del borde y κ su curvatura.

Como se ve, ésta velocidad es proporcional al producto de la fuerza impulsora por la movilidad; la anisotropía en cualquiera de los dos parámetros modificarán la evolución microestructural durante el crecimiento de grano.

En general, se puede esperar que la anisotropía en la energía provoque la formación de textura, la evolución de un tipo de textura en otra y un cambio en la abundancia relativa de los diferentes tipos de bordes.

Además, la anisotropía en la movilidad puede modificar la evolución de la textura en un material inicialmente texturado.

La inclusión de la influencia de la textura se debe realizar considerando que no todas las características de los contornos de grano son idénticas, ni tampoco sus movilidades.

El modelo propuesto por Mehnert ⁶, consiste en la construcción de una matriz simétrica de movilidades de borde de grano, manteniendo la energía del mismo constante. Estas diferentes movilidades deben ser interpretadas como probabilidades de migración de los bordes de grano. Así, el suceso de una reorientación (o el suceso de un micromovimiento de migración) estará

determinado por la probabilidad genérica (del método convencional de Srolovitz / Radhakrishnan) multiplicada por la "movilidad" de cada tipo de borde de grano.

La probabilidad de transición será entonces:

$$p = \begin{cases} P_{(hkl-h'k'l')} \exp(-\Delta U / k_b T) & \text{si } \Delta U > 0 \\ P_{(hkl-h'k'l')} & \text{si } \Delta U \leq 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

donde $P_{(hkl-h'k'l')}$ son los elementos de la matriz de movilidad. Estos factores de movilidad se introducen con el fin de asignar diferentes propiedades a los distintos tipos de bordes de grano¹⁷. Esto se corresponde con la idea de que los bordes de grano con alta desorientación cristalográfica tienen mayor movilidad, y *viceversa*.

El factor de movilidad específico se debe tomar de una matriz dada dependiendo del sitio elegido antes ($Q_i \equiv hkl$) y después ($Q_j \equiv h'k'l'$) del intento de reorientación.

2.2.4. Incorporación del fenómeno de anclaje por partículas de segunda fase

Para tener en cuenta la presencia de partículas de segunda fase en el proceso de simulación, se debe agregar en algunos sitios de red de la matriz un valor diferente de spin a los ya existentes, el cual no cambia durante la simulación si se considera que las partículas de segunda fase no se disuelven.

2.3. DESARROLLO DEL SOFTWARE

Para el desarrollo de la simulación de crecimiento de grano por método Monte Carlo, se utilizó el programa MATLAB 5.3, haciéndolo correr en una computadora pentium III de 800 MHz con 256 MB de memoria RAM. En el **ANEXO 1** se presentan los diagramas de flujo correspondiente a los procesos desarrollados.

El programa se planteó en forma modular, con un eje central que va llamando a los diferentes módulos en los cuales se ejecutan las subrutinas.

2.3.1. Datos iniciales para la simulación

Para iniciar la simulación el programa solicita los siguientes datos:

- *Tamaño de la matriz*, (N), que simula la microestructura inicial. Se consideró una matriz cuadrada (300x300), en 2D, en donde cada grano fue representado por un número del 0 al 19, es decir un total de 20 números Q_i .

- *Factor de energía de interfase, (J)*. Esta es una constante positiva que fija la escala de energía de la simulación y varía con la temperatura según ¹⁸:

$$J = J_0 \exp (-Q_g/RT)$$

donde Q_g es la energía de activación térmica del borde de grano ¹⁹.

Ante la falta de datos de energía de borde de grano, se tomó un valor constante de $\gamma = 0.8 \text{ J/m}^2$, valor característico para bordes de grano de una aleación Fe-Si ²⁰. Este valor multiplicado por el área mínima de cada elemento de la matriz ($1 \mu\text{m}^2$) da un $J = 8 \times 10^{-13}$ Joule.

- *Cantidad de orientaciones, (Q)*, que en nuestro caso fue de 20 orientaciones de grano. Este número de orientaciones se distribuyó entre las componentes {110}, {100}, {112}, {111} y random, de acuerdo a los porcentajes relativos medidos por difracción de rayos X para la muestra inicial.
- *Temperatura, (T)*, la que se mantuvo en 1000 °K para la mayoría de las simulaciones.
- *Incorporación de segunda fase, %*, indica la cantidad de partículas de segunda fase a incorporar en posiciones aleatorias otorgándole un valor $Q_i = 21$.
- *Tiempo Monte Carlo, MCS*, indica el tiempo de simulación.

2.3.2. Generación de la microestructura

A todos los elementos de la matriz se le asigna aleatoriamente un valor de orientación (Q_i). Un grano se define por lugares de red vecinos que poseen la misma orientación y un borde de grano por el lugar entre dos sitios de red vecinos con diferentes orientaciones. La microestructura así obtenida se consideró como microestructura inicial.

REFERENCIAS CAPÍTULO II

- ¹ Metrópolis N. and Ulam S., J.Am. Stat. Assoc., 44, 335 (1949).
- ² Metrópolis N., Rosembluth, A.W., Rosembluth, M.N., Teller, A.H. and Teller, E., J.Chem.Phys., 21, 1087.
- ³ Srolovitz D.J., Anderson M.P., Grest G.S.; Scripta Metall. 17, 241 (1983)
- ⁴ Anderson M.P., Srolovitz D.J., Grest G.S.; Acta Metall. 32, 783 (1984)
- ⁵ Srolovitz D.J., Anderson M.P., Grest G.S.; Acta Metall. 32, 793 (1984)
- ⁶ Radhakrishnan B., Zacharia T.; Met. Mat. Trans. 26^a, 167 (1995)
- ⁷ Mehnert K., Klimanek P.; Computational Mat. Sci., 7, 103 (1996)
- ⁸ Jiang Y., Mombach J.C.M., Glazier J.A.; Phys. Rev. E, 52, 4, 52 (1995)
- ⁹ Blikstein P., Tschiptschin A.P.; Mat. Research, 2, 3, 133 (1999)
- ¹⁰ Tavernier Ph., Szpunar J.A.; Acta Metall Mater 39, 4, 549 (1991)
- ¹¹ Tavernier Ph., Szpunar J.A.; Acta Metall Mater 39, 4, 557 (1991)
- ¹² Holm E.A., Hassold G.N., Miodownik M.A.; Acta Mater. 49, 2981 (2001)
- ¹³ Humphreys F.J.; Mat.Sci.Tech, 8, 135 (1992)
- ¹⁴ Abbruzzese G., Lücke K.; Materials Science Forum 55, 204-206 (1996)
- ¹⁵ Liu Y., Baudin T., Panelle R.; Scripta Mater. 34, 11, 1679 (1996)
- ¹⁶ Beichi I., Sullivan F.; The Metropolis algorithm, Computing Science & Engineering, 65-69 Jan./Feb. (2000)
- ¹⁷ Rollett A.D., Srolovitz D.J., Anderson M.P.; Acta Metall., Vol.37, 1227 (1989)
- ¹⁸ Saito Y., Enamoto M.; ISIJ Int. Vol. 32, N° 3, 267 (1992)
- ¹⁹ Yi J., Xianjin W.; '96 China Materials Symp., CMRS, Beijing, 399 (1996)
- ²⁰ Doherty

CAPÍTULO III

PROCEDIMIENTO Y RESULTADOS EXPERIMENTALES

3.1. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

El acero utilizado en este estudio, que identificamos con el nombre de acero H, corresponde a un acero nacional experimental, cuya composición química se acercan a los conocidos internacionalmente como "Laminaciones Quarter-Quarter"^{1,2}, aunque sin alcanzar los contenidos de Al característicos de dichos aceros y con un porcentaje de silicio algo superior. Sin embargo, la suma de ambos se encuentra en el orden del 0,5%.

Este acero H, presenta un contenido de silicio más elevado que las laminaciones comunes. La presencia de mayores tenores de silicio disminuye las pérdidas magnéticas totales fundamentalmente a través de su componente de pérdidas parásitas, al aumentar la resistividad del acero.

El aluminio, agregado normalmente como elemento desoxidante, tiene una fuerte influencia sobre el comportamiento del acero al crecimiento de grano.

La composición del material estudiado experimentalmente, se muestra en la tabla 3.1. La microestructura inicial del material está totalmente recristalizada, según se ve en la Fig. 3.1; con granos de forma poligonal, claramente separados unos de otros por bordes de alto ángulo. El material inicial tiene un tamaño medio de grano de 11 μm .

Tabla 3.1. Composición Química del material inicial

	%C	%S	%Mn	%P	%Si	%Al	%N
wt.%	0.050	0.004	0.61	0.045	0.40	0.075	0.0051

Las muestras usadas en este trabajo fueron envejecidas en un horno vertical con temperatura y atmósfera controladas. Las muestras fueron calentadas, a una tasa de 5 °C por minuto hasta alcanzar las temperaturas de 600, 650, 700 °C respectivamente, y extraídas del horno a esas temperaturas.

Otros grupos de muestras fueron envejecidos isotérmicamente a 700°C °C , distintos períodos de tiempo entre 0 y los 120 minutos. Los tratamientos de descarbonación se realizaron en una atmósfera mixta de N₂+15%H₂ , saturada en agua a 30°C. Los contenidos de carbón fueron analizados en una máquina LECO CS-44 M762-300.

Las muestras fueron pulidas paralelas al plano de las chapas y atacadas con ácido nítrico en etanol al 2% para revelar la microestructura. Los cambios estructurales se analizaron usando microscopía óptica.

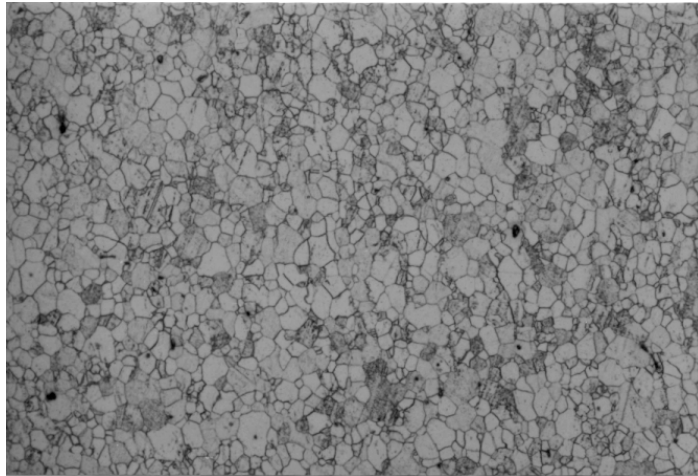


Figura 3.1. Micrografía óptica de la microestructura de la muestra en condiciones iniciales (Magnificación x 200)

Se utilizó Difracción de rayos X (DRX) para examinar los cambios en las orientaciones de los granos usando el método de Figura de Polos Inversa³. Un especial cuidado se tuvo en la preparación de las muestras puliendo las superficies hasta alúmina de 0.5µm. El método de Figura de Polos Inversa, consiste en representar las intensidades difractadas por varias familias de planos en proyecciones estándar, correspondientes a las tres secciones de la chapa, ND , RD y TD. Siendo; ND la superficie de la chapa, RD la cara perpendicular a la dirección de laminación y TD la cara transversal, perpendicular a las otras dos. Usualmente, las intensidades son normalizadas con las intensidades difractadas por una muestra sin textura, o sea, polvo del mismo material, de tamaño de partícula pequeño y montado cuidadosamente en el portamuestra.

Así, el *coeficiente de textura* (TC_{hkl}) correspondiente a cada familia de planos {hkl}, se ha definido³ como :

$$TC_{hkl} = \frac{I_{(hkl)} / I_{R(hkl)}}{\frac{1}{n} \sum_i^n \left(I_{(hkl)} / I_{R(hkl)} \right)_i} \quad (3.1)$$

donde:

$I_{(hkl)}$: representa la intensidad del pico *hkl* del material texturado analizado,

$I_{R(hkl)}$: es la intensidad del pico *hkl* de la muestra en polvo del mismo material,

n , es el número de picos del difractograma.

El valor TC_{hkl} para un dado plano $\{hkl\}$ indica el porcentaje de granos que están orientados con este plano $\{hkl\}$ paralelo a la superficie bajo estudio, (ya sea ND,RD o TD).

Las mediciones de textura se realizaron analizando los picos de intensidad de un diagrama de difracción de rayos, obtenidos con un goniómetro estándar. Los diagramas de difracción se obtuvieron con un difractómetro marca Phillips, con radiación α del cobre, con velocidad de barrido de 0.125° por minuto, con colimador de apertura de 1° y con colimador de recepción de 0.2 mm. Se analizaron los planos $\{100\}$, $\{110\}$, $\{112\}$, $\{111\}$ y $\{310\}$ en las tres caras de la chapa, ND,RD y TD.

3.2 . RESULTADOS EXPERIMENTALES

3.2.1. Descarburación

El contenido de carbono de las muestras tratadas se ve en la Tabla 3.2. Puede observarse que el porcentaje de carbono inicial no cambia apreciablemente durante el calentamiento hasta 650 °C. Este carbono se encuentra principalmente en forma disuelta en la ferrita, aunque en algunos bordes de grano se presenta en formaciones pseudo-perlíticas.

Al alcanzar los 700 °C, una alta proporción de átomos de carbono has difundido y reaccionado con la atmósfera descarburante. Durante el período isotérmico a esta temperatura, el tenor de carbono sigue disminuyendo alcanzando valores tan bajos como de 0,002 %C. El mismo comportamiento se aprecia durante el tratamiento térmico a 750 °C.

Tabla 3.2: Efecto de la etapa de calentamiento y de permanencia a temperatura en la descarburación.

	Inicial	600 °C 0 min	650 °C 0 min	700 °C 0 min	700 °C 120 min	750 °C 0 min	750 °C 120 min
%C	0.050	0.049	0.042	0.008	0.002	0.006	0.002

La observación con microscopio electrónico de barrido, MEB, permite apreciar bordes de grano sin partículas de CFe_3 . Observando con aumentos de hasta X5000 no se pudieron distinguir otras partículas, como los NAI, en los bordes de grano. Teniendo en cuenta esto, se puede concluir que todas las muestras estaban en fase ferrítica durante los tratamiento isotérmicos a 700 °C y por lo tanto, cualquier transformación metalúrgica de la microestructura se producirá en un metal monofásico.

3.2.2. Evolución microestructural

La muestra inicial del acero H presenta una microestructura consistente en granos equiaxiados provenientes del tratamiento de recocido estacionario que se le efectúa en la empresa productora (Fig.

3.1). Las pequeñas deformaciones de la etapa de temper rolling no son visibles en la observación metalográfica de la muestra.

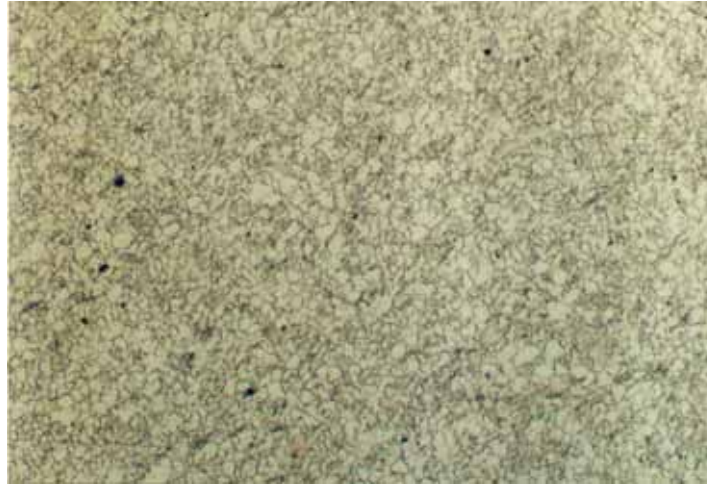


Figura 3.2. Micrografía óptica de la microestructura de la muestra calentada hasta 650 °C (Magnificación x 100)

La microestructura de los especímenes obtenidos por calentamiento a 600° y 650 °C respectivamente, no muestran aún crecimiento de grano (ver Fig.3.2).

Cuando las muestras alcanzan los 700 °C, se observa el inicio de una microestructura duplex. La microestructura muestra unos pocos granos aislados que han experimentado un gran crecimiento, inmersos en la matriz inicial formada por granos pequeños, como se observa, en la figura 3.3.a)

La microestructura de los especímenes obtenidos durante el tratamiento isotérmico a 700 °C, muestra que el comportamiento anómalo del proceso de crecimiento de grano finaliza luego de 120 minutos a esa temperatura (Figura 3.3.d)). Este fenómeno de crecimiento de grano isotérmico fue observado durante el proceso de envejecimiento descarburante (Figuras 3.3.a-d).

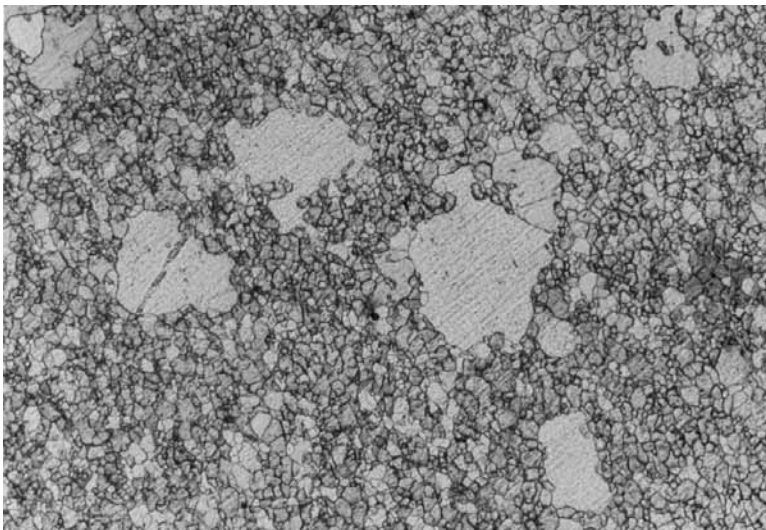


Figura 3.3.a)
Microestructura de las muestras envejecidas a 700° C, durante 0 minutos.
(Magnificación x 100)

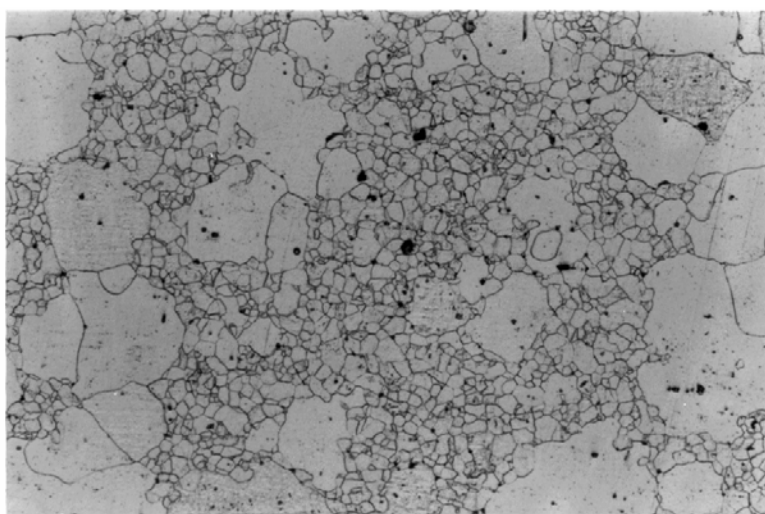


Figura 3.3.b)
Microestructura de las
muestras envejecidas a
700° C, durante 15
minutos.
(Magnificación x 100)

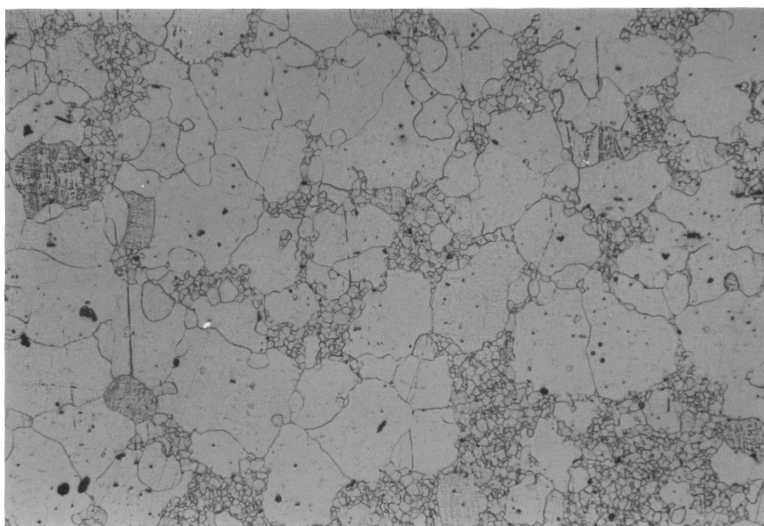


Figura 3.3.c)
Microestructura de las
muestras envejecidas a
700° C, durante 30
minutos.
(Magnificación x 100)

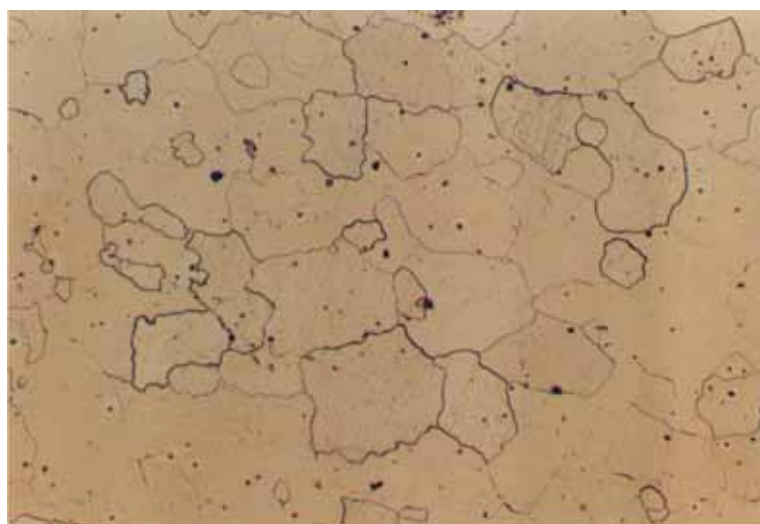


Figura 3.3.d)
Microestructura de las
muestras envejecidas a
700° C, durante 180
minutos.
(Magnificación x 100)

En la Tabla 3.3 se muestra la variación del tamaño de grano como función de la temperatura y tiempo de recocido.

Tabla 3.3. Efecto de la etapa de calentamiento y de permanencia a temperatura en el tamaño de grano.

	Condición inicial	600°C min.	650°C 0 min.	700°C 0 min.	700°C 120 min.	750°C 0 min.	750°C 120 min.
Tamaño de grano [μm]	11.0	11.0	9.9	Duplex 9.0-87.0	132.0	120.8	135.3

3.2.3. Evolución de la textura

La textura cristalográfica tiene una influencia muy importante sobre los aceros de uso eléctrico.. Esto hace que sea de fundamental interés, estudiar la evolución de la textura durante los procesos térmicos a los que el material es sometido. En la figura 3.4 se observa la evolución de la textura en la superficie de la muestra estudiada, como función de la temperatura. El apéndice A contiene los difractogramas a partir de los cuales se determinaron los coeficientes de textura, TC .

El espécimen en condición inicial, tiene una orientación cristalográfica según la fibra γ , $\{111\} \langle hkl \rangle$, la cual es típica de los materiales BCC laminados en frío .

En las muestras obtenidas por calentamiento hasta 600 °C, no se modifican las componentes de textura $\{111\}$ y $\{112\}$, respecto a la muestra inicial; mientras que la orientación $\{100\}$ inicialmente ausente, se incrementa.

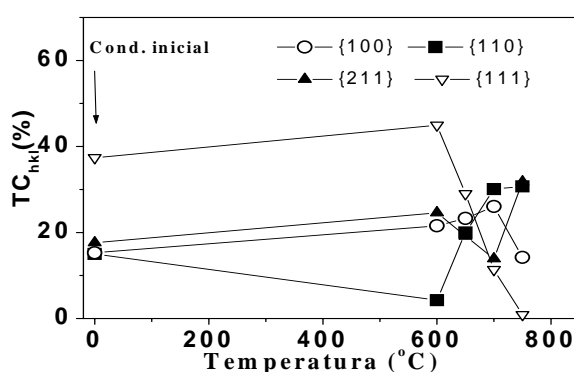


Figura 3.4. Coeficientes de textura en el plano ND de la chapa de acero a distintas temperaturas.

Las muestras obtenidas por calentamiento hasta 700 °C evidencian importantes cambios en la textura. Las componentes de textura {111} y {112} desaparecen, mientras que aparecen las componentes {110} y {100}.

En las muestras obtenidas por calentamiento hasta 750 °C también hay importantes cambios en la textura. La intensa componente {111}, observada en el material inicial, se anula casi por completo, mientras la componente {112} y, la previamente ausente, componente {110} se intensifican

El efecto sobre la textura del tratamiento isotérmico a 700 °C, se muestra en la Figura 3.5.

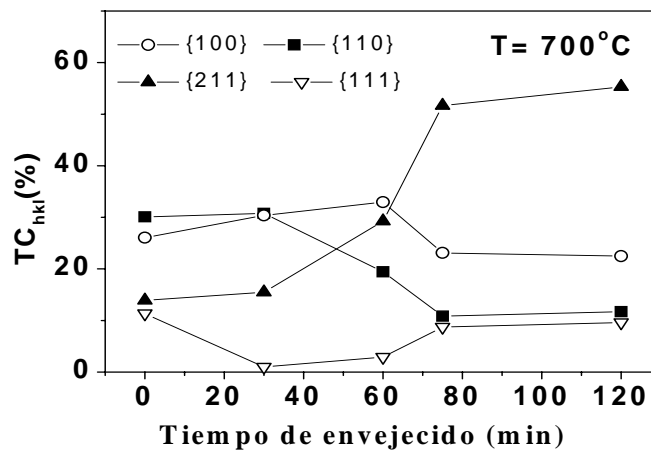


Figure 3.5. Coeficientes de textura en el plano ND de la chapa de acero después de distintos tiempos de envejecido a 700^o C.

Después de un recocido de 30 minutos a 700 °C, las componentes {100} y {110} permanecen como las componentes principales de textura. Sin embargo cuando las muestras son recocidas por 120 minutos a 700 °C, la principal componente de textura es la componente {112}.

Las muestras envejecidas a 750 °C durante 120 minutos, presentan, además de la componente {112}, a las componentes {100}.

Los estudios de textura cristalográfica realizados, indican que los cambios en la textura de los especímenes ocurren durante los tratamientos térmicos descarburantes. Este fenómeno es particularmente marcado en los tratamientos de envejecido a 700 °C y 750 °C. Aunque los tamaños de grano óptimos para los aceros eléctricos se encuentran en el rango de los 120 - 180 μm⁴, que es lo que se obtiene para los tratamientos térmicos a 700 °C y 750 °C, las componentes de textura presentes a esas temperaturas son bien diferentes.

Durante los tratamientos isotérmicos a 700 °C se desarrollan las mejores componentes de textura, desde el punto de vista magnético. Mientras que las muestras obtenidas por calentamiento hasta los 750 °C ya poseen la componente {112}, que es una componente deletérea para las propiedades magnéticas. Los tratamientos isotérmicos a 700 °C permiten que existe una buena correlación entre las propiedades magnéticas alcanzadas y la evolución microestructural y de la variación de textura en este acero⁵. Por este motivo el estudio de crecimiento de grano se concentra en las muestras tratadas a 700 °C

3.3 . CONCLUSIONES

Este estudio permite concluir que:

- A los fines magnéticos, el comportamiento microestructural de este acero es adecuado ya que los tratamientos térmicos permiten la obtención de un tamaño de grano acorde con bajas pérdidas magnéticas, fundamentalmente en su componente de pérdidas parásitas (Pp+Pa)⁵.
- Los cambios en la orientación cristalográfica son adecuados para los fines de uso de este tipo de acero. El cálculo del Coeficiente de Textura indica altos valores para las orientaciones {100} y {110} para la muestra tratada a 700°C durante 30 minutos . En la **Figura 3.5** se ve la evolución de los componentes de textura para las muestras recocidas distintos tiempos a 700°C.

REFERENCIAS CAPÍTULO III

¹ Advance Materials and Processes, Vol. 149, N° 1, (1996)

² Goodenow R.H.; Trans.ASM, , 59, 804, (1966)

³ B.D.Cullity, Elements of X-Ray Diffraction, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA (1978).

⁴ E.Rabkin, Scripta Mater.39, 1631 , (1998)

⁵ C.Oldani, S.P.Silvetti; Scripta Mater.43, 129 , (2000)

CAPÍTULO IV

RESULTADOS DE LA SIMULACION

4.1. INTRODUCCION

El control de la microestructura en aleaciones metálicas es fundamental para aumentar sus propiedades mecánicas y magnéticas. La predicción de la evolución microestructural, debido a recristalización, crecimiento de grano, etc, comenzando desde estructuras iniciales arbitrarias, es muy importante para el procesamiento y diseño de los materiales. Por ejemplo, el crecimiento de grano en sistemas policristalinos ha sido extensamente estudiado y así, muchos fenómenos físicos han sido modelados¹⁻⁹.

Numerosos estudios han sido realizados desarrollando modelos computacionales¹⁰⁻¹⁴ de crecimiento de grano en dos dimensiones (2D). Aunque en un importante número de trabajos previos se ha estudiado el crecimiento de grano utilizando la técnica de Monte Carlo^{6,8,13,14-18}, ninguno ha acoplado de manera cuantitativa el crecimiento de grano con la evolución de la textura.

En general, en todos los modelos, se han hecho muchas suposiciones para simplificar los cálculos. Sin embargo, aún con esas aproximaciones, un interesante número de resultados han sido conseguidos. Por ejemplo Grest *et al.*¹⁸ encontraron que el exponente del crecimiento de grano puede variar entre 2 y 4, dependiendo de la magnitud de la anisotropía de la energía de borde de grano con la misorientación. In Ref [15] Rollet *et al.* sugirieron que el crecimiento de grano puede conducir a un marcado cambio en la textura.

Además del crecimiento normal de grano, un material puede presentar crecimiento anormal de grano, llamado también recristalización secundaria. El crecimiento anormal de grano solo puede producirse si el crecimiento normal ha sido inhibido. Esa inhibición ocurre, en muchos casos, por la existencia de finas partículas de segunda fase, que anclan el borde de grano. Para este caso, Hillert¹ ha demostrado como el tamaño de partículas y su distribución influyen en el tamaño de grano crítico necesario para el crecimiento anormal de grano. Por otro lado la inhibición del crecimiento normal de

grano puede ocurrir, si existe una textura primaria muy intensa. En este caso, solo los granos con una intensa desviación de orientación, es decir muy texturados, podrán crecer anormalmente^{4,5}.

El objetivo de ese trabajo fue desarrollar un modelo aproximado por Monte Carlo (MC), con el cual describir el crecimiento de grano en distintos sistemas policristalinos.

El análisis está enfocado en sistemas monofásicos y bifásicos sin textura. Sistemas monofásicos y bifásicos con textura. Sistemas con crecimiento normal de grano y sistema con crecimiento anormal de grano o recristalización secundaria.

4.2. MARCO TEORICO

Los borde de granos de los sólidos policristalinos forman una compleja estructura. A temperaturas elevadas, el movimiento de los bordes de granos tiene como objetivo disminuir la energía total del borde de grano¹¹.

La velocidad a la que migra el borde de grano, es el principal factor que controla la cinética del crecimiento de grano. La velocidad local de migración del borde de grano depende de la energía de borde de grano, de la movilidad y de la curvatura local del borde de grano¹¹. La velocidad V , del segmento del borde de grano, caracterizado por una energía γ , una movilidad M , y un radio de curvatura κ está dado por la ecuación [1.5].

La velocidad media de migración de un borde de grano ubicado entre dos granos u y w es:

$$V_{uw} = \gamma_{uw} M_{uw} (\kappa_u^{-1} - \kappa_w^{-1}) \quad [4.2]$$

donde $(\kappa_u^{-1} - \kappa_w^{-1})$ es la curvatura promedio para ese borde de grano.

Granos pequeños desaparecen como consecuencia de la migración del borde de grano, y se incrementa el tamaño de grano promedio de los granos que sobreviven.

A pesar de que el proceso de crecimiento de grano es muy complejo, una gran cantidad de resultados experimentales han mostrado que el crecimiento de grano puede ser descrito por esta relación:

$$D - D_o = Ct^n$$

o bien

$$D^{1/n} - D_o^{1/n} = Kt(-Q/RT) \quad [4.3]$$

donde: Q es la energía de activación, D_o y D son los tamaños de grano medio inicial y final respectivamente, t es el tiempo de envejecido, R es la constante general de los gases, T es la temperatura absoluta, n es el exponente del crecimiento de grano y K y C son constantes.

Cuando el crecimiento de grano tiene un exponente de crecimiento de grano igual a 0.5, la ecuación [4.2] se reduce a la ecuación [1.9], conocida como ley parabólica de crecimiento de grano¹⁹

El punto **2.3. Desarrollo del Software**, del capítulo 2, se describe el algoritmo de simulación de crecimiento de grano utilizado en esta investigación.

El programa se planteó en forma modular, con un eje central que va llamando a los otros módulos en los cuales se ejecutan las subrutinas. Un esquema de los pasos que sigue el programa de simulación, incluidas las subrutinas, se ven en los diagramas de flujo que se muestran en el Apéndice B.

4.3. RESULTADOS Y DISCUSION

4.3.1 Caso 1 : Sistema Monofásico

Como primer caso de estudio para validar la rutina MC, se modeló un sistema formado por una única fase. El objetivo de esta prueba fue asegurar que el Hamiltoniano de la ec. [2.5] podía reproducir la velocidad del borde de grano descrita en la ec. [4.2] (que es equivalente a la ec. [2.7]), y determinar la extensión del ruido estadístico, asociado con los cálculos de velocidad de migración. Además, el Caso 1 fue utilizado para comprobar la calidad del generador de números *random* usado en la rutina MC.

La matriz que representa una distribución al azar de granos, es una matriz de (300 x 300), donde cada grano fue representado por un número del 0 al 19, es decir un total de 20 números Q_i .

La Figura 4.1 muestra la distribución inicial de granos para el caso 1. Los granos tienen un tamaño medio inicial de 10.80 μm (MIL). Y se ha supuesto que el material inicial está sin texturar.

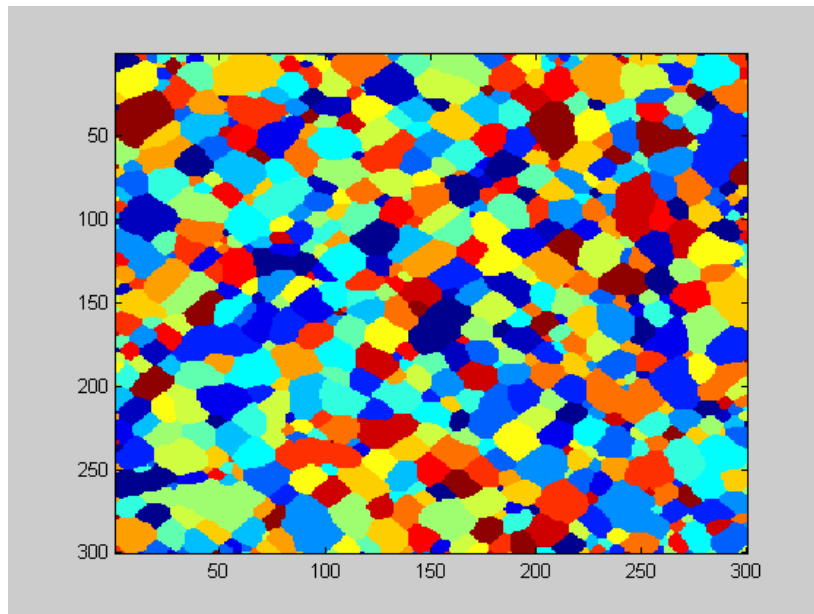


Figura 4.1. Distribución inicial de granos, por predicción MC, en un sistema monofásico ideal, con un tamaño medio de grano de 10,80 μm

Los resultados de la simulación para el caso 1 se muestran en la Figs. 4.2 y 4.9. La Figura 4.2 muestra la predicción MC de la microestructura, luego de un tiempo de simulación de 3156 pasos de Monte Carlo (MCS), donde el tamaño medio final de grano es de $47.80 \mu\text{m}$. Del gráfico tamaño medio de grano en función del tiempo (Fig.9), se determinó que el exponente del crecimiento de grano (es decir el valor de n en la ec.4.3) es $n = 0.40 \pm 0.01$.

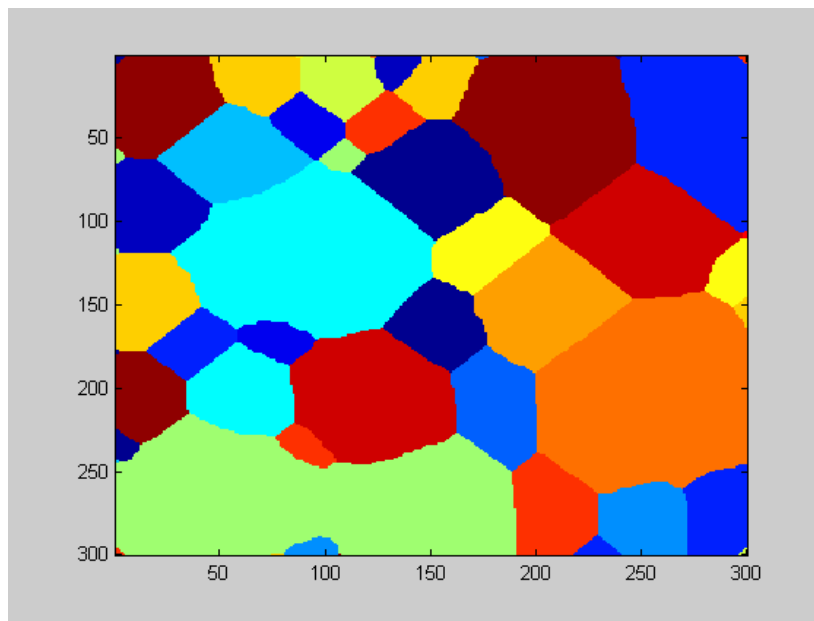


Figura 4.2. Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema monofásico, luego de un tiempo de simulación de 3156 MCS.

4.3.2 Caso 2 : Sistema Bifásico

Como segundo caso de estudio, se modeló un sistema que permitiera simular el crecimiento de grano en un sistema bifásico, donde el tamaño de las partículas de segunda fase permanece constante, sin engrosar y sin disolver. Para ello, a la matriz original, de (300×300) , que representa una distribución al azar de granos, se le agregaron sitios distribuidos al azar, los cuales representan a las partículas de segunda fase. Esto se hizo introduciendo el número $Q_i = 21$.

La figura 4.3 muestra la distribución inicial de granos para un sistema bifásico, con una fracción volumétrica del 2% de partículas de segunda fase. La microestructura inicial tiene un tamaño medio de grano de la fase matriz de $10,80 \mu\text{m}$ y las partículas de segunda fase tienen las dimensiones de un monocristal. Se supone que el material inicial está sin texturar.

Los resultados de la simulación para el caso 2 se muestran en la Figs. 4.4 y 4.9. La Figura 4.4 muestra la predicción MC de la microestructura, luego de un tiempo de simulación de 1205 MCS. En este caso el tamaño medio de grano de la matriz es de $14.68 \mu\text{m}$. Del gráfico tamaño medio de grano

en función del tiempo (Fig.4.9), se tiene que el exponente de crecimiento de grano predicho para el caso 2, fue igual a $n = 0.051 \pm 0.007$.

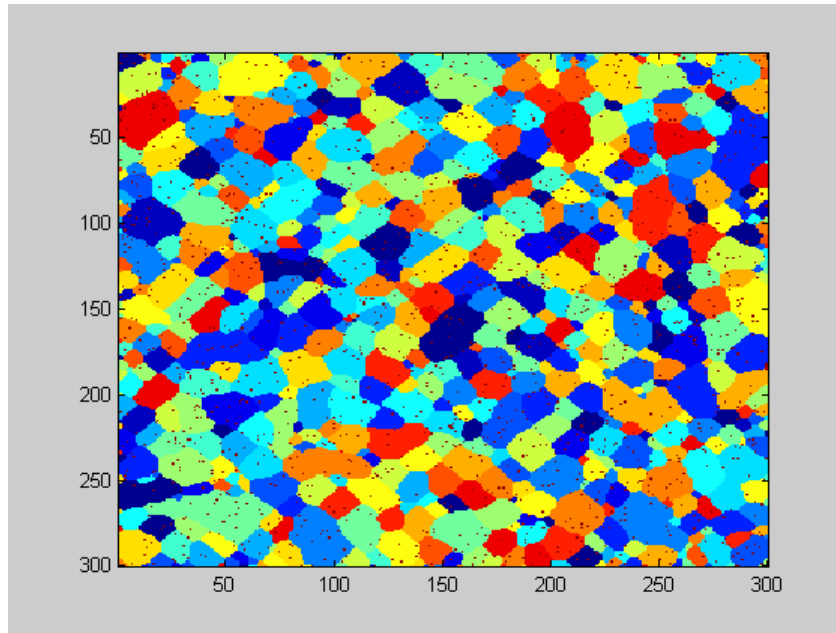


Figura 4.3. Distribución inicial de granos, por predicción MC, en un sistema bifásico ideal, con un tamaño medio de grano de $10,80 \mu\text{m}$

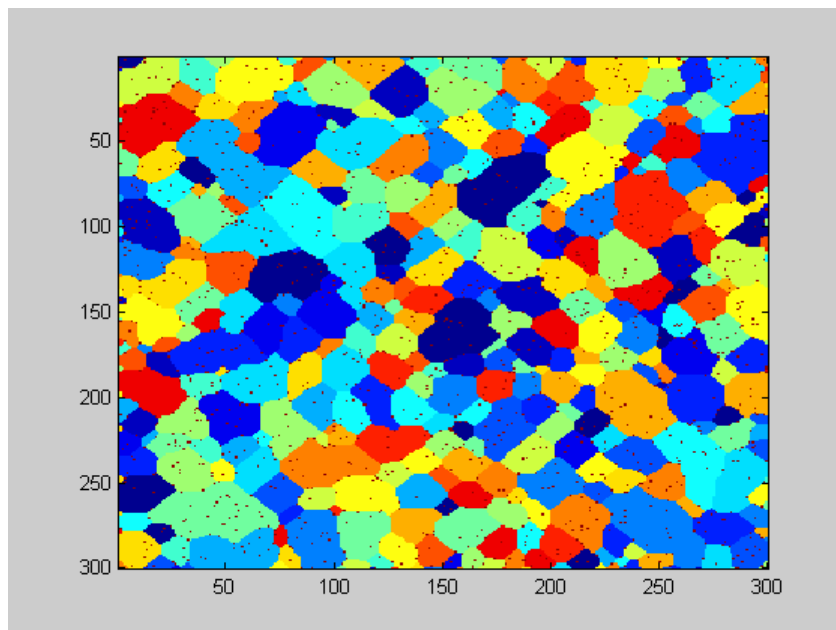


Figura 4.4. Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema bifásico, luego de un tiempo de simulación de 1205 MCS.

4.3.3 Sistemas Monofásicos y Bifásicos Texturados

Se agregó al programa de simulación, la propiedad de textura cristalográfica, a los sistemas monofásico y bifásicos descritos anteriormente, en el caso 1 y caso 2 respectivamente.

En este nuevo análisis se tienen en cuenta los siguientes puntos:

- a) los distintos granos representados por los números Q_i fueron divididos en subconjuntos, donde cada subconjunto representa una orientación cristalográfica diferente. Para el análisis se tuvieron en cuenta cuatro componentes de textura.
- b) para calcular la probabilidad de transición de un sitio de red en un borde de grano, se tiene en cuenta un factor relacionado con la movilidad de borde de grano entre dos orientaciones cristalográficas distintas.

La distribución inicial de granos del material monofásico texturado (caso 3), tiene un tamaño medio inicial de grano de $10.80 \mu\text{m}$ (igual que el caso1).

Los resultados de la simulación se muestran en la Figs. 4.5 y 4.9. La Figura 4.5 muestra la predicción MC de la microestructura, luego de un tiempo de simulación de 3930 MCS, donde el tamaño medio final de grano es de $58.44 \mu\text{m}$. La Fig.4.9 muestra la predicción MC de la cinética de crecimiento de grano para el caso 3. Se encontró que el exponente del crecimiento de grano es $n = 0.43 \pm 0.04$.

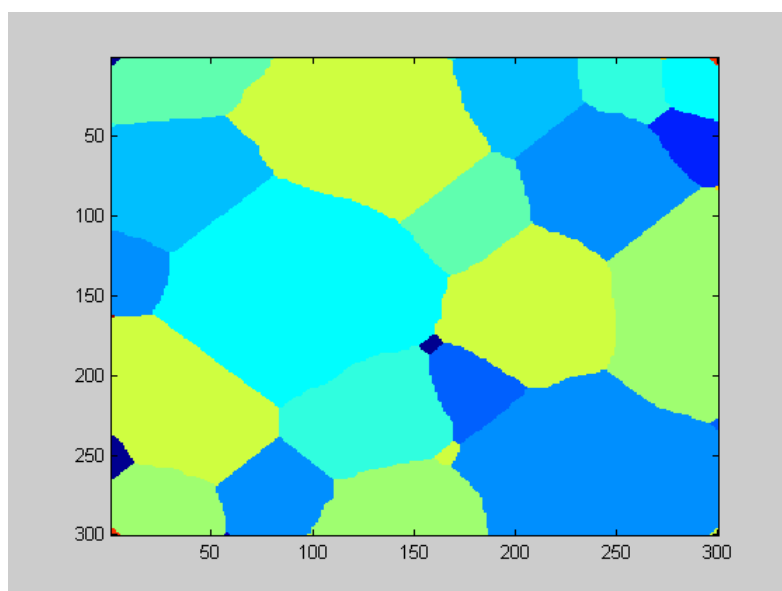


Figura 4.5. Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema monofásico con textura, luego de un tiempo de simulación de 3930 MCS.

La distribución inicial de granos del material bifásico texturado (caso 4) es igual que el caso 2. La microestructura inicial tiene un tamaño medio de grano de la fase matriz de 10,80 μm y las partículas de segunda fase tienen las dimensiones de un monocristal.

Los resultados de la simulación se muestran en la Figs. 4.6 y 4.9. La Figura 4.6 muestra la predicción MC de la microestructura, luego de un tiempo de simulación de 1183 MCS, donde el tamaño medio final de grano es de 14.40 μm . Del gráfico tamaño medio de grano en función del tiempo (Fig.4.9), se tiene que el exponente de crecimiento de grano predicho para el caso 4, fue igual a $n = 0.047 \pm 0.003$.

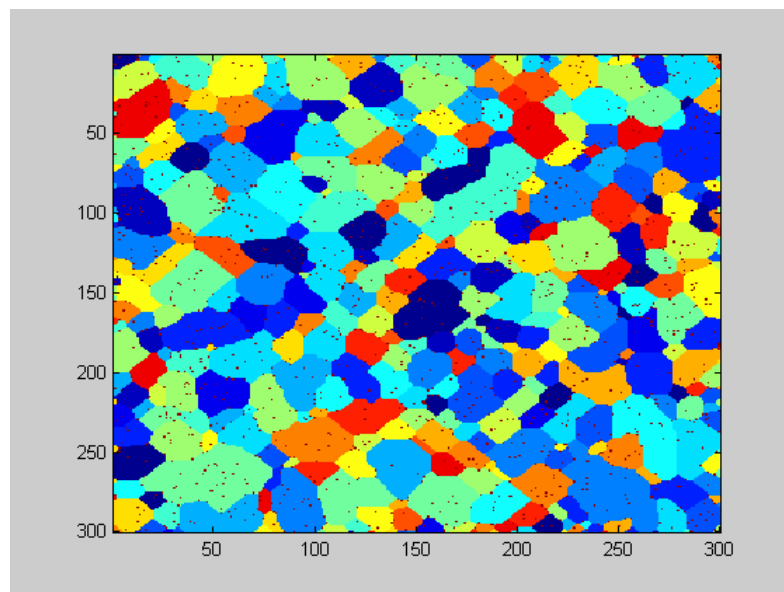


Figura 4.6. Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema bifásico con textura, luego de un tiempo de simulación de 1183 MCS.

4.3.4 Caso 5. Sistema Bifásico Texturado, con disolución de las partículas de segunda fase.

Se agregó al programa de simulación, la probabilidad de disolución de las partículas de segunda fase. En este análisis se tuvieron en cuenta los siguientes puntos:

- a) se eliminó la restricción de tener las partículas de segunda fase ancladas,
- b) al calcular la probabilidad de transición, se agregó un factor de disolución, que para este caso particular fue 0.001.

La figura 4.7 muestra la distribución inicial de granos para un sistema bifásico texturado, con disolución de partículas de segunda fase, (caso 5). La microestructura inicial tiene un tamaño medio

de grano de la fase matriz de $10,80 \mu\text{m}$ y las partículas de segunda fase, con una fracción volumétrica inicial del 2%, tienen las dimensiones de un monocristal.

Los resultados de la simulación se muestran en la Figs. 4.8 y 4.9. La Figura 4.8 muestra la predicción MC de la microestructura, luego de un tiempo de simulación de 1523 MCS, donde el tamaño medio final de grano es de $22.16 \mu\text{m}$. Para ese tiempo de simulación se obtuvo una fracción volumétrica de partículas de segunda fase de 0.44 %. Como puede verse, la fracción volumétrica de partículas de segunda fase cae del 2% al 0.44 %, luego de un tiempo de simulación de 1523 MCS. La Fig.4.9 muestra la predicción MC de la cinética de crecimiento de grano para el caso 5. Se encontró que el exponente del crecimiento de grano es $n = 0.21 \pm 0.03$.

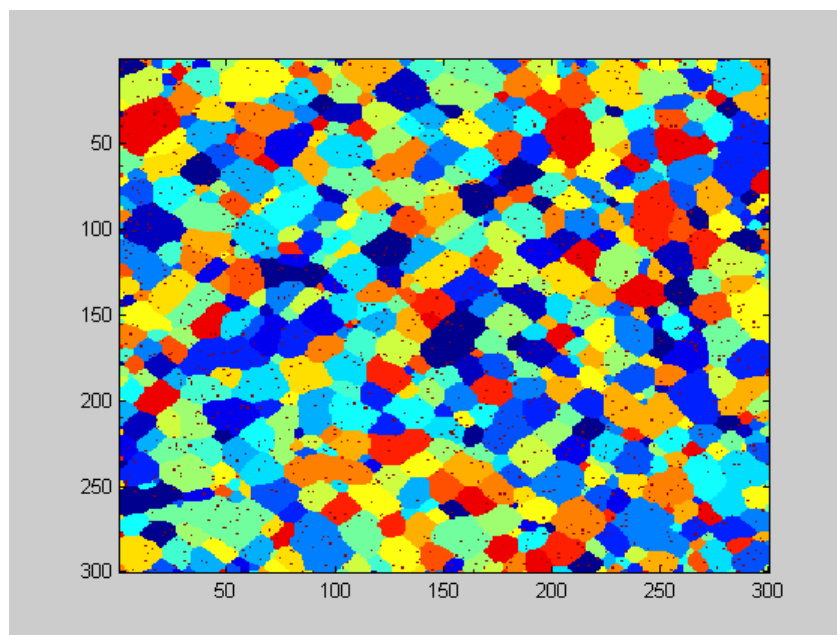


Figura 4.7. Distribución inicial de granos, por predicción MC, en un sistema bifásico texturado, con una fracción de 2% de partículas de segunda fase. Tamaño medio de grano de la matriz $10,80 \mu\text{m}$.

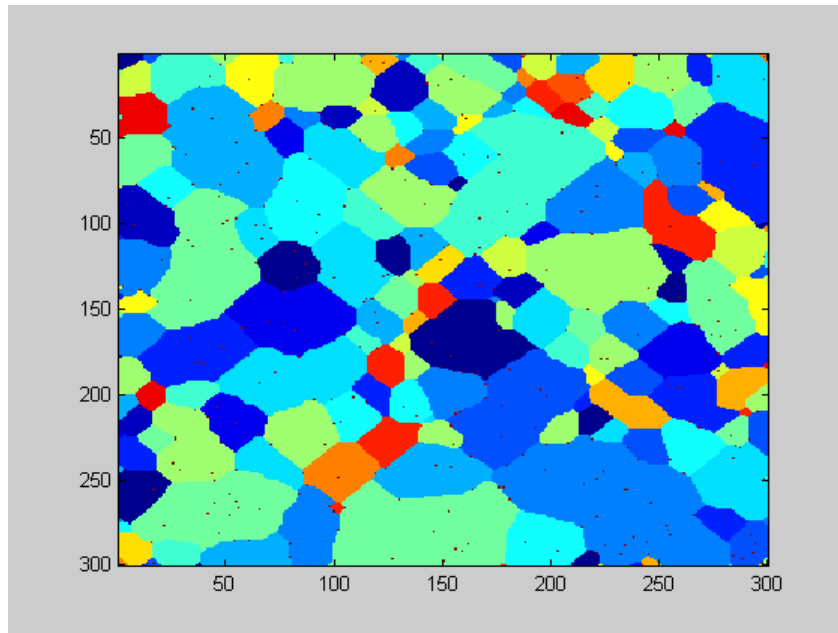


Figura 4.8. Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema bifásico con textura y disolución de partículas de segunda fase , luego de un tiempo de simulación de 1523 MCS.

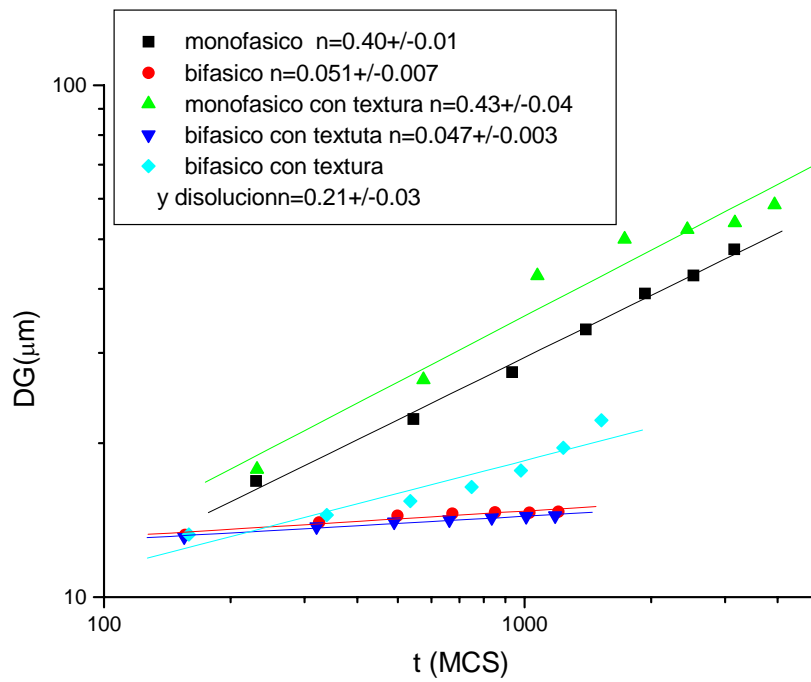


Figura 4.9. Predicción MC, de la cinética de crecimiento de grano, para los cinco casos simulados. Los resultados se presentan con sus respectivas rectas de aproximación lineal.

Las figuras 4.10-4.12 muestran la predicción MC de la evolución de la textura, en términos de cuatro componentes de textura presentes, para los casos 3, 4 y 5, respectivamente.

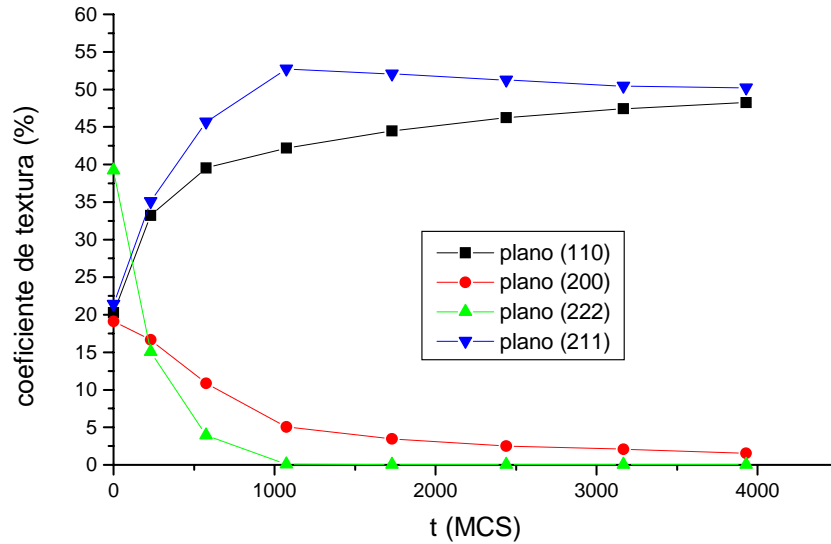


Figura 4.10. Predicción MC de la evolución de la textura para el sistema monofásico con textura cristalográfica (caso 3)

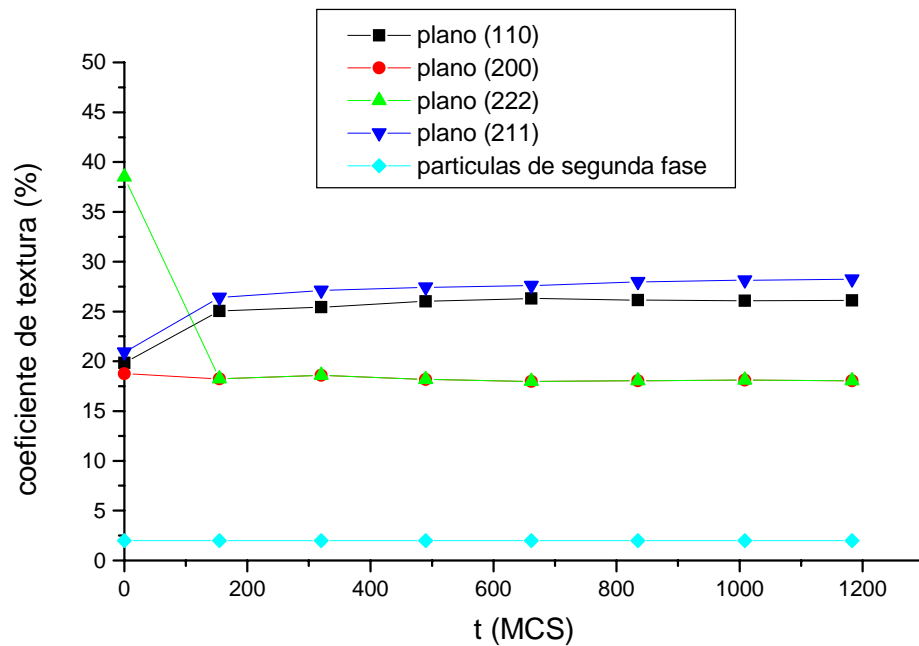


Figura 4.11. Predicción MC de la evolución de la textura para el sistema bifásico con textura cristalográfica (caso 4)

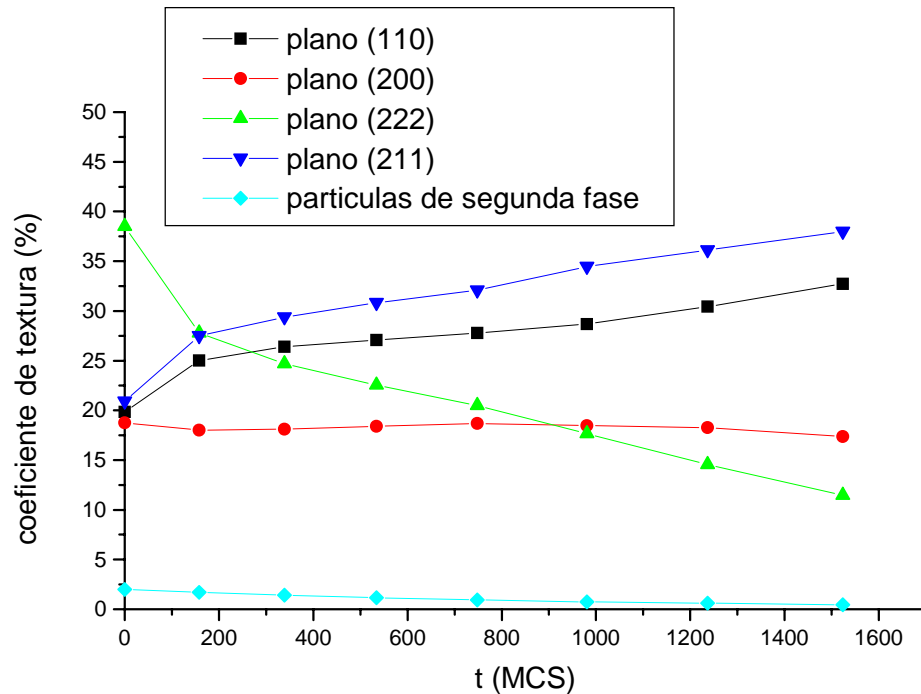


Figura 4.12. Predicción MC de la evolución de la textura para el sistema bifásico con textura cristalográfica y disolución de partículas de segunda fase (caso 5)

4.3.5. Análisis sobre datos experimentales.

En esta etapa de la investigación se trabaja sobre la base de los datos experimentales, obtenidos en un acero de bajo carbono, descritos en el capítulo 3. La tabla 4.1 contiene los datos de la evolución de los coeficientes de textura, $TC_{(hkl)}$, obtenidos por difracción de rayos X, para las siguientes cuatro familias de planos cristalinos (110), (111), (200) y (211).

Para la simulación MC se usa un sistema bifásico con textura, con una fracción inicial de partícula de segunda fase de 0,2%. La evolución experimental de la textura en función del tiempo de envejecido se muestra en la Fig.4.14.b). (y en Fig. 3.5)

Tabla 4.1: Evolución de los coeficientes de textura, TC_{hkl} , durante las distintas etapas de envejecido.

Temperature (°C)	$TC_{\{200\}}$ (%)	$TC_{\{110\}}$ (%)	$TC_{\{211\}}$ (%)	$TC_{\{222\}}$ (%)
Recibida	15.27	15.03	17.63	37.36
600	21.55	4.25	24.59	44.95
700	26.05	30.15	13.90	11.35
750	14.21	30.71	31.77	0.55

Considerando como $P(hkl-h'k'l')$, la probabilidad de transición del plano cristalino (hkl) al plano cristalino ($h'k'l'$), para nuestro acero tenemos:

$$P(200-110) = 0.95$$

$$P(111-110) = 0.95$$

$$P(211-110) = 0.6$$

$$P(211-200) = 0.9$$

Para el resto de las posibles combinaciones tenemos $P(hkl-h'k'l') = 1$

Considerando que estas probabilidades están relacionadas con la movilidad de borde de grano^{1,11}, entonces

$P(hkl-h'k'l')$ esta directamente relacionada con la movilidad del grano con orientación ($h'k'l'$) hacia el grano con orientación (hkl), así,

$$P(hkl-h'k'l') \propto M(h'k'l'-hkl).$$

Si $P(hkl-h'k'l') = P(h'k'l'-hkl) = 0$ se tiene movilidad cero, lo que significa que el borde de grano esta anclado.

Con estas condiciones se realizaron cinco simulaciones denominadas HH1, HH2, HH3, HH4, HH5, cuyas predicciones MC se muestran en la figura 4.13. Los resultados obtenidos indican que el tamaño de grano tuvo un crecimiento similar en todas las simulaciones. En las simulaciones estudiadas el exponente de crecimiento de grano varia entre $n = 0.35 \pm 0.01$ y $n = 0.37 \pm 0.01$

Como puede verse en la Figura 4.13, la cinética de crecimiento de grano de las cinco simulaciones, son prácticamente iguales para tiempos de simulación cortos (menores que 200MCS). Pero para tiempos de simulación mayores las predicciones MC de crecimiento de grano difieren ligeramente entre si.

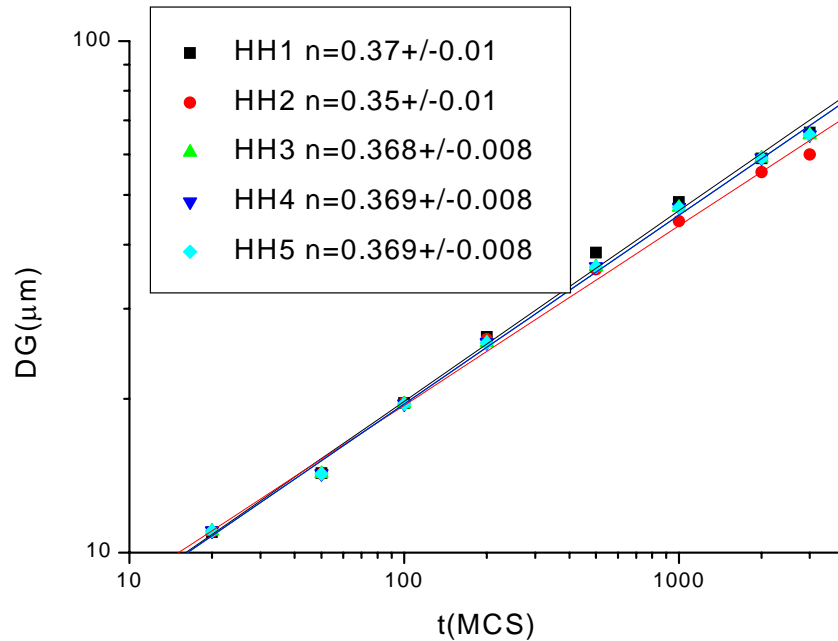


Figura 4.13. Predicción MC del crecimiento de grano en el sistema acero de bajo carbono, que tiene una fracción de partícula de segunda fase 0,2%, para las distintas condiciones de probabilidad analizadas.

La Figura 4.14 muestra la predicción MC de la evolución de la textura en función del tiempo para las distintas condiciones de probabilidad analizadas, juntamente con la evolución experimental (Fig.4.14.b).

Como puede observarse, la predicción MC de la textura presenta pequeñas diferencias en lo que respecta a la evolución de la familia de planos (211), cuando se lo compara con los datos de textura experimentales.

La simulación HH2 es la que mas se aparta de los resultados experimentales. Mientras que la simulación HH1, es la que mas se aproxima a los datos experimentales. La simulación HH1 no solo logra un buen ajuste en las tendencias de evolución de la textura, si no que también reproduce cuantitativamente las orientaciones cristalográficas analizadas.

Por otro lado, las simulaciones HH3, HH4 y HH5 arrojan resultados de evolución de textura aproximadamente iguales entre si.

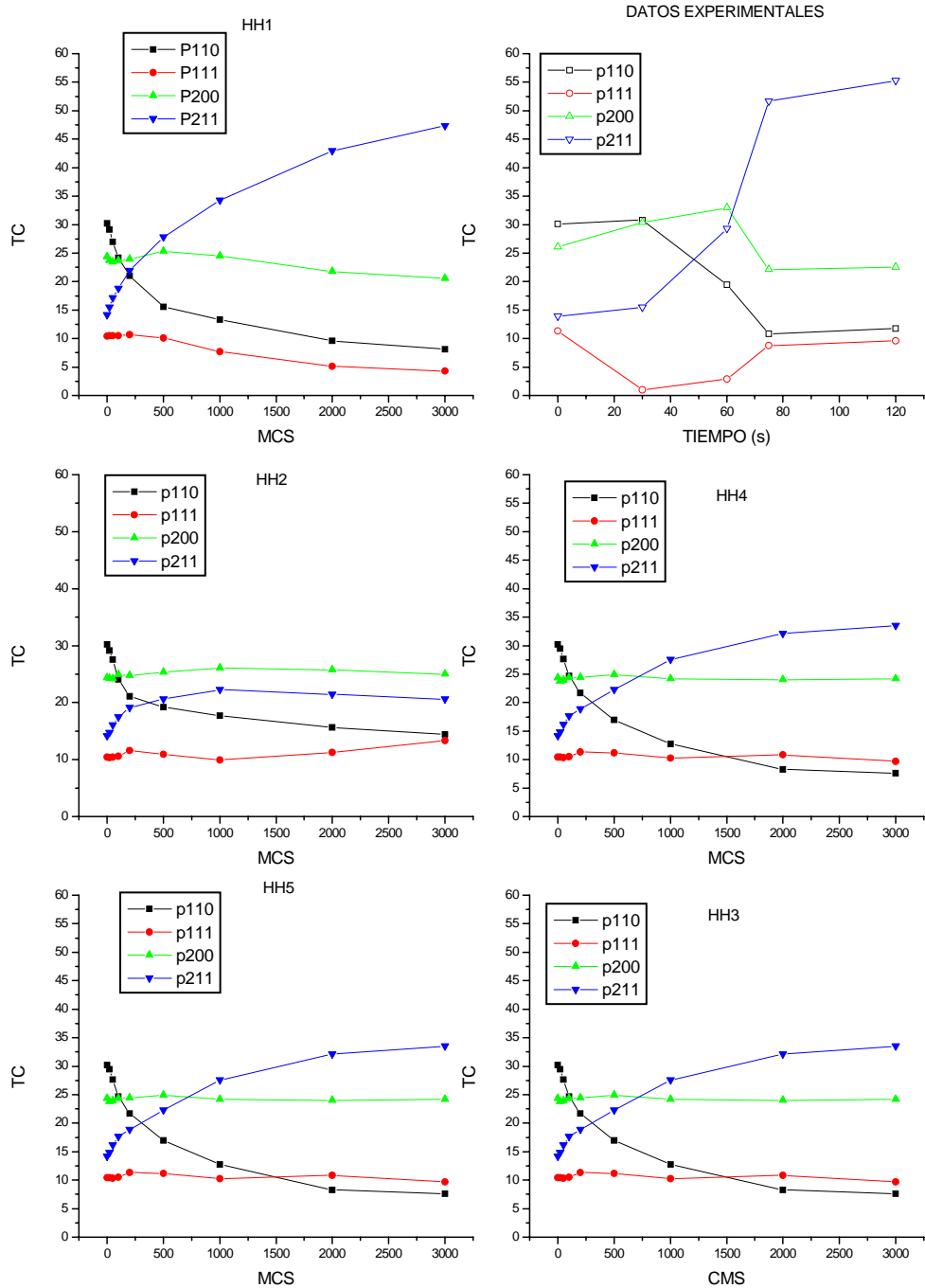


Figura 4.14. Evolución experimental y simulada por MC de la textura en un sistema bifásico, con una fracción de partícula de segunda fase 0,2%, con textura inicial.

4.3.6. Análisis de crecimiento anormal de grano.

Para explorar la posibilidad de crecimiento anormal de grano en sistemas reales, usamos los resultados experimentales descritos en el Cap. 3 para construir la microestructura inicial y proveer propiedades al borde de grano.

Teniendo esto en cuenta, utilizamos un algoritmo de crecimiento de grano que analice la evolución preferencial de unos pocos granos, es decir un algoritmo para crecimiento anormal de grano.

Primero, se considera un sistema monofásico. En la matriz inicial de veinte orientaciones, se elige una orientación como la de mayor movilidad de borde de grano, esto se indica con $P(0-hkl) = 0.4$. El resto de las posibles combinaciones se consideró igual a 1. En el algoritmo solo se utiliza movimiento de borde de grano para hacer evolucionar la microestructura, no se tienen en cuenta eventos de nucleación.

Las figuras 4.15- 4.18 muestran la evolución de la microestructura para tiempos de 0, 100, 200 y 500 MCS.

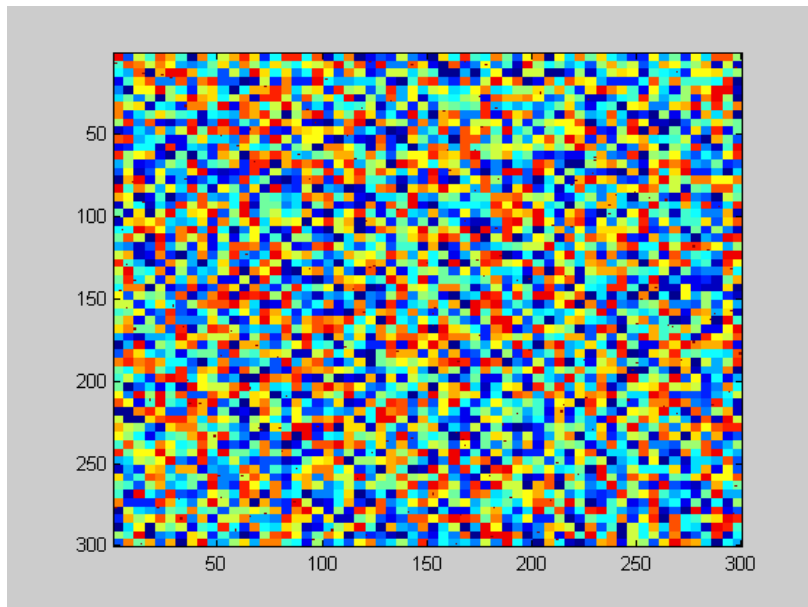


Figura 4.15. Distribución inicial de granos, por predicción MC, para un sistema monofásico ($t = 0$ MCS)

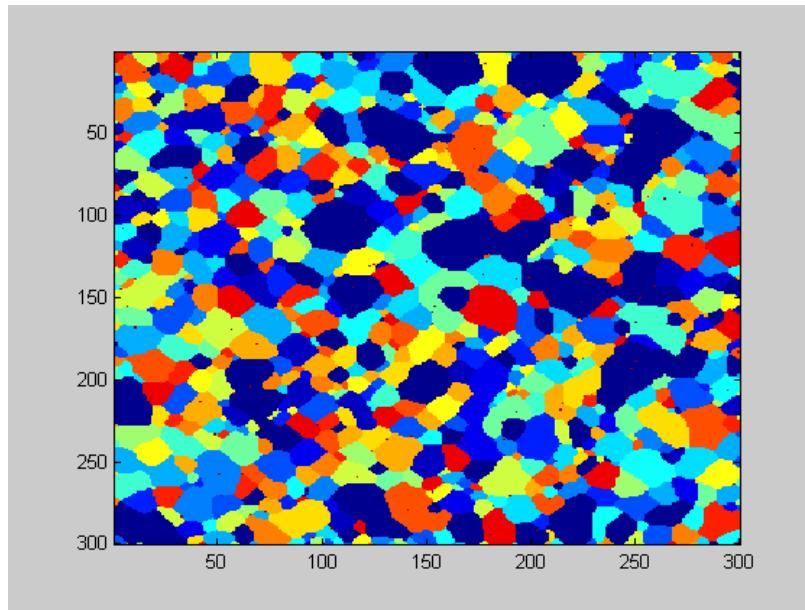


Figura 4.16 Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema monofásico, con probabilidad $P(0-hkl) = 0.4$. luego de 100 MCS.

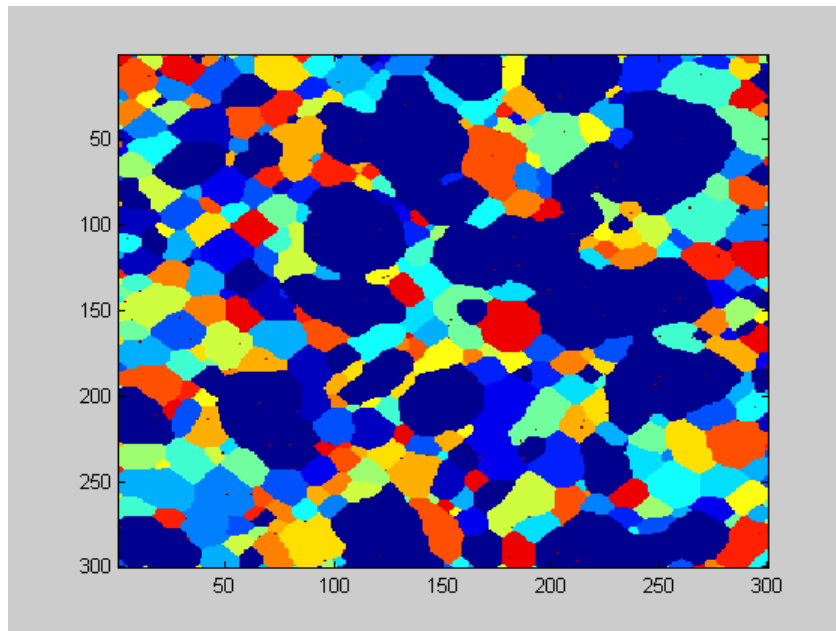


Figura 4.17 Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema monofásico, con probabilidad $P(0-hkl) = 0.4$. luego de 200 MCS.

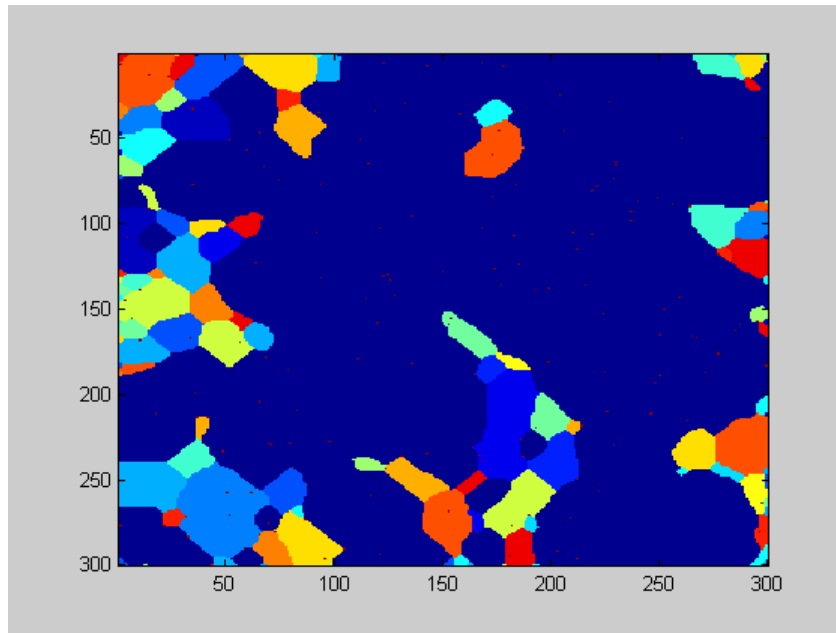


Figura 4.18 Predicción MC de la evolución de la microestructura para el sistema monofásico, con probabilidad $P(0\text{-}hkl) = 0.4$, luego de 500 MCS.

En segundo lugar, se trabaja con sistemas bifásicos. En la matriz inicial de veinte orientaciones, se selecciona un único grano de distinta orientación en el centro de la matriz inicial, representado por $Q_i = 23$.

Este sistema se diferencia de los analizados anteriormente en dos aspectos, a saber:

- a) la movilidad del grano central, representado por $Q_i = 23$, está dado por $P(h'k'l'_{23}\text{-}hkl)$ y
- b) el coeficiente de disolución de las partículas de segunda fase, representado por $Q_i = 21$, tiene probabilidad $P(h'k'l'_{21}\text{-}hkl)$.

La figura 4.19 muestra la matriz inicial con el grano central de distinta orientación, y una fracción inicial de segunda fase de 2%.

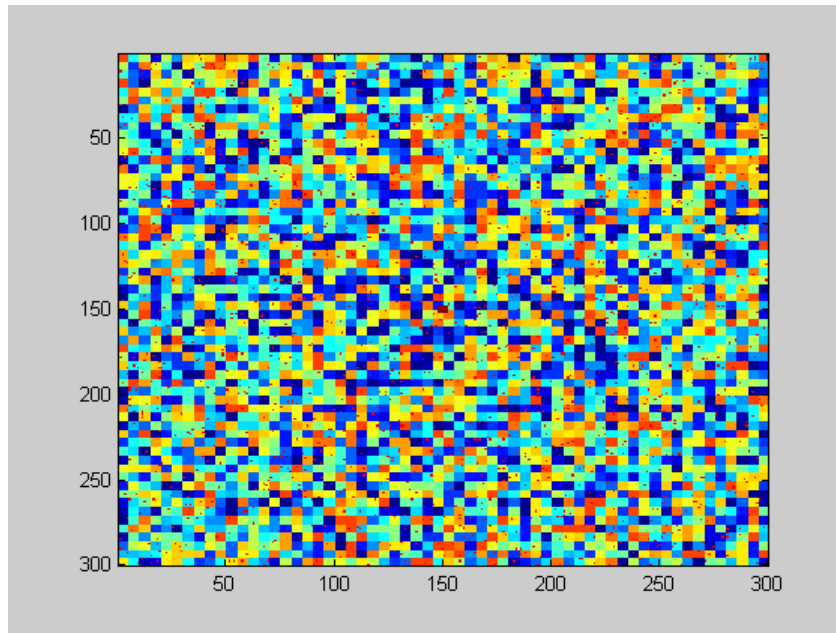


Figura 4.19. Distribución inicial con el grano central de distinta orientación, y una fracción de segunda fase de 2%.

Si consideramos que:

- a) las partículas de segunda fase ubicados en los bordes del grano anormal, poseen una tasa mayor de disolución que las partículas ubicadas en el resto de las orientaciones cristalográficas, y
- b) que el grano representado por $Q_i = 23$, con $P(h'k'l'_{23}-hkl)$, tiene mayor movilidad respecto de las otras orientaciones,

se observara crecimiento anormal de grano.

La figura 4.20 muestra la evolución de la microestructura, predicha por MC, para un tiempo de 1000 MCS, con $P(h'k'l'_{21}-hkl_{23}) = 1$ y $P(h'k'l'_{21}-hkl) = 0$ (lo que indica solamente disolución total en los bordes del grano $Q_i = 23$), y con movilidad del grano anormal $P(h'k'l'_{23}-hkl) \approx 0$.

Si se modifica la movilidad del grano anormal a $P(hkl_{23}-h'k'l') = 0.3$, la microestructura evoluciona según se muestra en la Figura 4.21.

Por ultimo en la figura 4.22 se muestra la evolución de la microestructura, predicha por MC, para un tiempo de 3000 MCS con $P(h'k'l'_{21}-hkl_{23}) = 10^{-2}$ y $P(h'k'l'_{21}-hkl) = 10^{-5}$ y con movilidad del grano anormal $P(hkl_{23}-h'k'l') = 0.1$

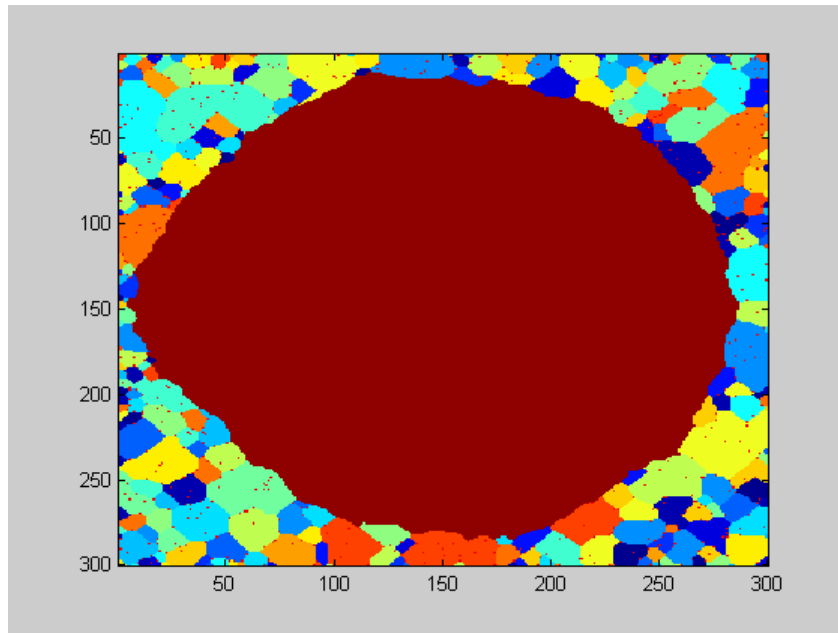


Figura 4.20. Evolución de la microestructura, predicha por MC, para un tiempo de 1000 MCS, y con movilidad del grano anormal $P(hkl_{23} - h'k'l') = 0$

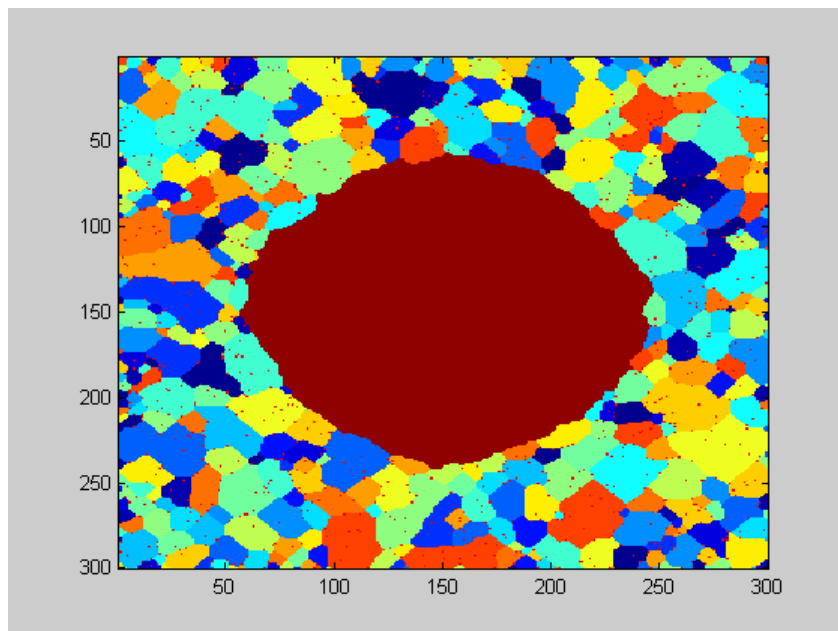


Figura 4.21. Evolución de la microestructura, predicha por MC, para un tiempo de 1000 MCS, y con movilidad del grano anormal $P(hkl_{23} - h'k'l') = 0.3$

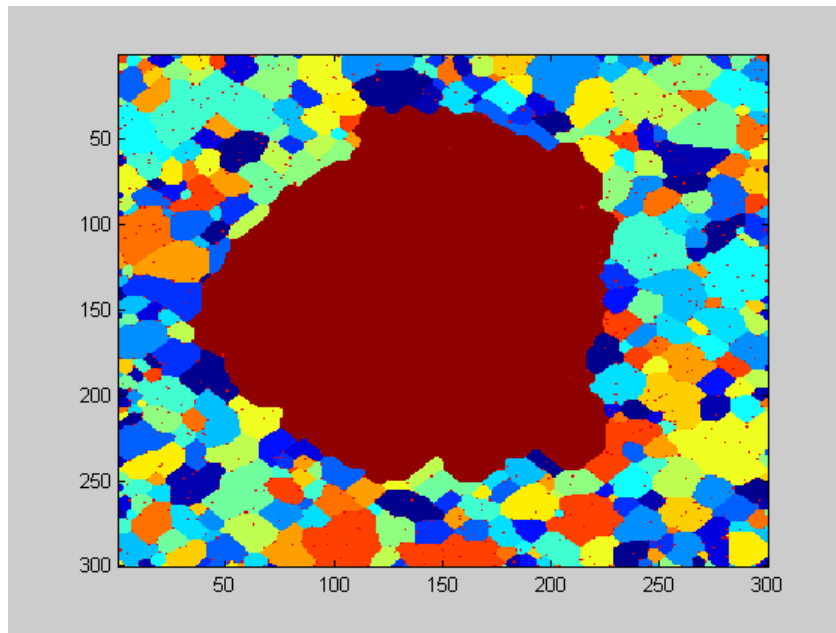


Figura 4.22. Evolución de la microestructura, predicha por MC, para un tiempo de 3000 MCS, y con $P(h'k'l'_{21} - hkl_{23}) = 10^{-2}$ y $P(h'k'l'_{21} - hkl) = 10^{-5}$ y con movilidad del grano anormal $P(hkl_{23} - h'k'l') = 0.1$

4.4 . CONCLUSIONES

En este estudio se desarrolla una rutina de simulación Monte Carlo, en la se establece la interacción entre crecimiento de grano y evolución de la textura. Los datos iniciales, son una combinación de la microestructura inicial, datos de textura y movilidad del borde de grano.

Por otro lado, la simulación provee la habilidad de describir y controlar todos los parámetros del modelo de simulación, en cada etapa del crecimiento de grano. Muchas simulaciones fueron realizadas para confirmar la validez de la rutina de simulación, y se analizaron casos específicos de crecimiento de grano, basados en información experimental obtenida en un acero tratado térmicamente.

Las siguientes conclusiones pueden puntualizarse en este trabajo:

1. El exponente del crecimiento de grano, del material monofásico sin texturar, indicado como caso 1, es similar al del material monofásico texturado, caso 3, para tiempos cortos. Sin embargo, cuando el tiempo de simulación se incrementa, el material texturado se caracteriza por un periodo de crecimiento de grano lento. Este periodo de crecimiento lento esta correlacionado con los cambios de textura. La lentitud del crecimiento de grano sería el resultado de la formación de una textura con orientaciones preferenciales. (ver Fig.4.10)
2. Si comparamos el comportamiento de la textura en los sistemas monofásicos y bifásicos, ambos texturados, casos 3 y 4 respectivamente, encontramos que el sistema monofásico texturado refuerza

dos, de las cuatro componentes de textura analizadas, mientras que las otras dos componentes tienden a anularse, incluida la componente inicial mas intensa (ver Fig. 4.10 y 4.11). Por el contrario, en el sistema bifásico texturado, los coeficientes de textura tienden a tomar valores similares. Si analizamos el exponente de crecimiento de grano en el sistema monofásico texturado, encontramos que el crecimiento de grano es rápido, mientras que el sistema bifásico texturado experimenta un crecimiento muy lento. Esto se debería fundamentalmente, a la presencia de partículas de segunda fase que frenan el crecimiento del grano de la matriz.

3. Si comparamos el comportamiento de los sistemas bifásico texturados, con fracción constante de partículas de segunda fase y con disolución de partículas, casos 4 y 5 respectivamente, encontramos que el sistema con disolución de partículas de segunda fase experimenta un crecimiento de grano mucho más rápido (ver Fig. 4.9, 4.11 y 4.12). Esto indica que, efectivamente, las partículas de segunda fase son las responsables de anclar la movilidad del borde de grano.

4. La simulación MC de los datos experimentales, reproducen satisfactoriamente las tendencias de evolución de la textura, especialmente la simulación indicada como HH1 en la fig. 4.14. El estudio reproduce incluso, las variaciones cuantitativas que experimentan las orientaciones cristalográficas analizadas. Desde el punto de vista del crecimiento de grano, la simulación de los datos experimentales, predice un exponente mayor que el obtenido para el sistema del caso 5. Mas similar al valor de un sistema monofásico texturado.

Estos resultados indican que existe una fuerte correlación entre la textura desarrollada, y la fracción de partículas disueltas en el material, que se traduce finalmente, en la movilidad del borde de grano.

5. El método Monte Carlo desarrollado en este trabajo, puede ser modificado, sin mayores alteraciones, para incluir dependencias discretas de orientaciones cristalográficas, cambios en la movilidad de los bordes de grano, variaciones en la fracción de partículas presentes en el material. Así, se puede utilizar el método para analizar incluso, crecimiento anormal de grano. El algoritmo de crecimiento de grano que utilizamos, solo involucra la movilidad del borde de grano para hacer evolucionar la microestructura. En particular los resultados predichos por MC, presentes en la Fig. 4.21 y 4.22 muestran una evolución de la microestructura, similar a la observada en la Fig. 3.3a

REFERENCIAS CAPÍTULO IV

- ¹ M. Hiller; *Acta Metall.*13, 277 , (1965)
- ² N.P.Louat; *Acta Metall.*22, 721 , (1974)
- ³ F.R. Rhines, K.R.Craig; *Metall. Trans.*5, 413, (1974).
- ⁴ S.F.Kurtz. F.M. Carpay; *J.Appl. Phys.* 51, 5725, (1980)
- ⁵ H.Eichelkraut, G.Abbuzzese, K.Lucke; *Acta Metall.*36, 55 , (1988)
- ⁶ M.P.Anderson, G.S.Grest, D.J.Srolovitz; *Phil.Mag.*B59, 293, (1988)
- ⁷ K.Kawakasi, T.Nagai, K.Nakashima; *Phil.Mag.*B60, 399, (1989)
- ⁸ M.P.Anderson, D.J.Srolovitz, G.S.Grest, P.S.Sahni; *Acta Metall.*32, 784 , (1984)
- ⁹ H.V.Hatkinson; *Acta Metall.*36, 469, (1988)
- ¹⁰ Z. Yang, S.Sista, J.W.Elmer, T.Debroy; *Acta Mater.* 48, 4813, (2000)
- ¹¹ F.Wakai, N.Enomoto, H.Owaga; *Acta Mater.* 48, 1297, (2000)
- ¹² S.Xiaoyan, L.Guoquan, G.Nanju; *Sripta Mater.* 43, 355, (2000)
- ¹³ E.A.Holm, G.N.Hassold, M.A.Miodownik; *Acta Mater.* 49, 2981, (2001)
- ¹⁴ M.A.Miodownik, A.W.Godfrey, E.A.Holm, D.A.Hughes; *Acta Mater.* 47, 2661, (1999)
- ¹⁵ A.D.Rollet, D.J.Srolovitz, M.P.Anderson; *Acta Metall.*37, 1227 , (1989)
- ¹⁶ N.Ono, K.K.imura, T.Watanabe; ; *Acta Metall.*47, 1007 , (1999)
- ¹⁷ A.E.Holm, N.Zacharopoulos, D.J.Srolovitz; ; *Acta Metall.*46, 953 , (1998)
- ¹⁸ G.S.Grest, D.J.Srolovitz, M.P.Anderson; *Acta Metall.*33, 509 , (1985)
- ¹⁹ Aust K.T., Rutter J.W.; *Transaction AIME*, Vol.215, 119-127 (1959)
- ²⁰ Metrópolis N. and Ulam S., *J.Am. Stat. Assoc.*, 44, 335 (1949).

CAPÍTULO V

MODELO DE CRECIMIENTO DE GRANO

5.1. CRECIMIENTO DE GRANO EN UN SISTEMA MONOFÁSICO.

A pesar de la disponibilidad de predicciones teóricas muchos de los estudios experimentales de crecimiento de grano siguen la sugerencia de Beck¹, en el cual la cinética de crecimiento de grano sigue una relación de la forma:

$$R=K t^n$$

donde R es el tamaño de grano medio y t el tiempo.

Así, n puede ser determinada a partir de gráficos de log R en función de log t. Sin embargo, se han encontrado valores de n que están bien alejados del valor esperado, 0.5.

Podrían esperarse valores de n menores que 0.5, si la velocidad de migración del borde de grano no fuese una función lineal de la fuerza impulsora ΔP . Esto es, si la movilidad M del borde de grano fuese función de ΔP y, de esta forma, también de R.

Según esto, consideremos primero el crecimiento de grano de un sistema monofásico. En primera aproximación, consideraremos un grano esférico, en el que la energía de borde de grano, entre el grano esférico y otros granos de la matriz, es σ . La suposición principal es que debe haber equilibrio entre las tensiones superficiales en la interfase borde de grano esférico/interface de la matriz. Esto se muestra en la Figura.1, donde definimos las variables que están participando. Esto es: P_e , presión exterior; P_i , presión interior; σ , energía de borde de grano por unidad de superficie y R, radio del grano.

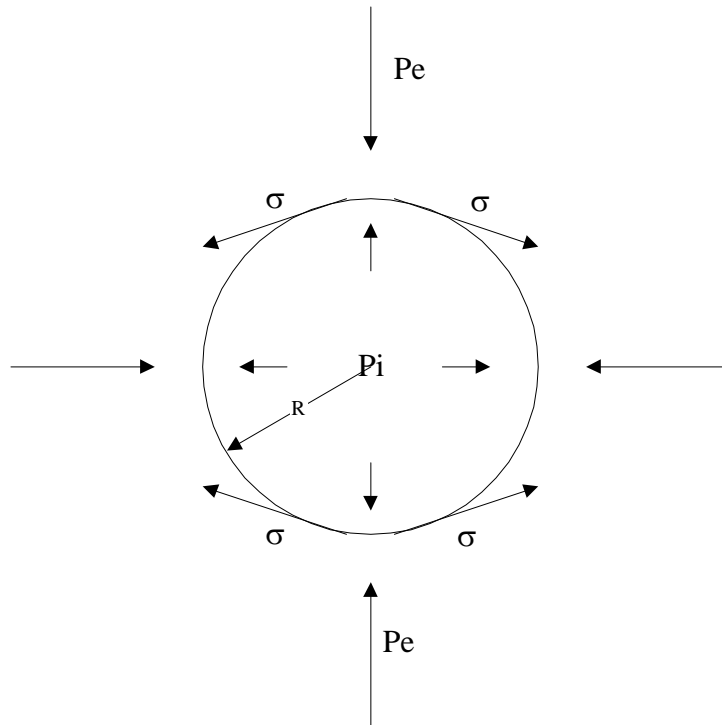


Figura 5.1: Ilustración esquemática de la Interacción entre un grano esférico y su entorno, a través de la interfase borde de grano.

El balance de fuerzas sobre el grano esférico es:

$$P_i 4\pi R^2 = P_e 4\pi R^2 + F_g \quad [5.1]$$

donde F_g es la fuerza en la superficie del grano, debida a la energía de borde de grano y apunta hacia el interior del grano.

La energía potencial sobre la superficie del grano es:

$$U_g = 4\pi R^2 \sigma$$

luego F_g la calculamos como:

$$|F_g| = \left| -\frac{dU_g}{dR} \right|$$

$$|F_g| = 8\pi R \sigma$$

con lo cual la ecuación (5.1) se expresa:

$$P_i 4\pi R^2 = P_e 4\pi R^2 + 8\pi R \sigma$$

reordenando

$$\Delta P = P_i - P_e$$

$$\Delta P = \frac{8\pi\sigma R}{4\pi R^2}$$

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R} \quad [5.2]$$

recordando que la velocidad de borde de grano es proporcional a la fuerza impulsora ΔP obtenemos

$$\frac{dR}{dt} \propto \Delta P \quad [5.3]$$

$$\frac{dR}{dt} \propto \frac{2\sigma}{R} \quad [5.4]$$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\mu}{R} \quad [5.4.1]$$

Así, la ec.5.4.1 nos da la velocidad de migración del borde de grano.

5.2. CRECIMIENTO DE GRANO EN UN SISTEMA BIFÁSICO.

Analicemos ahora el crecimiento de un grano esférico en un sistema bifásico.

Consideremos una distribución uniforme de partículas de segunda fase, de radio d . Sea f la fracción volumétrica de partículas de segunda fase y sea λ , la separación entre partículas, con

$$\lambda = \left(\frac{4\pi}{3f} \right)^{\frac{1}{3}} d \quad [5.5]$$

En la Figura 2 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 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.

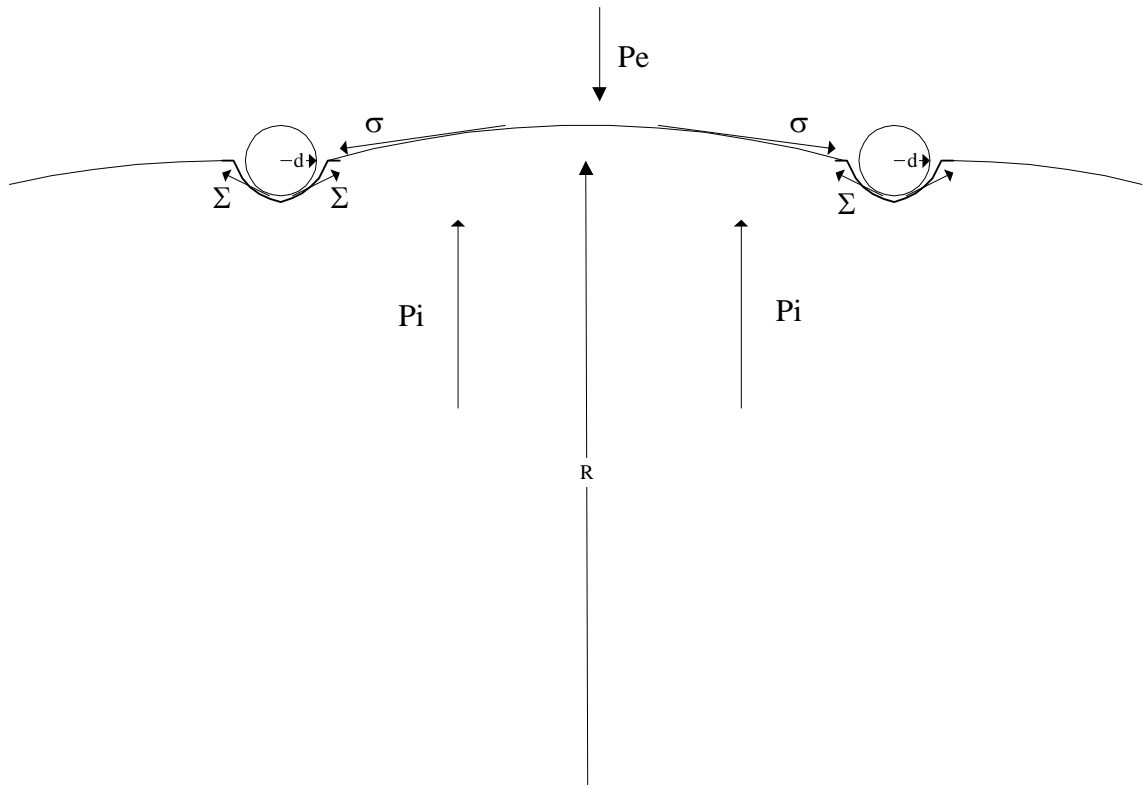


Figura 5.2: Interacción entre un borde de grano y una partícula esférica.

Considerando que la interfase entre la partícula de segunda fase y el borde de grano que avanza es de media partícula, la energía interfacial entre la partícula de segunda fase y el borde de grano es:

$$U_i = 2\pi d^2 \Sigma$$

luego, la fuerza en la interfase debido a una partícula es:

$$F_i = 4\pi d \Sigma$$

La fuerza total que oponen las partículas de segunda fase al avance del borde de grano, es la fuerza de cada partícula F_i por el número de partículas en la superficie del grano, N_{pg} .

Ahora bien, el número de partículas en la superficie del grano, es igual a la superficie del grano dividido por el cuadrado de la distancia entre las partículas de segunda fase, λ .

$$N_{pg} = \frac{4\pi R^2}{\lambda^2} \quad [5.6]$$

Por lo tanto, haciendo el balance de fuerzas se tiene:

$$P_i 4\pi R^2 = P_e 4\pi R^2 + 8\pi R \sigma - 4\pi d \Sigma \frac{4\pi R^2}{\lambda^2}$$

donde la fuerza impulsora es:

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R} - \frac{4\pi d \Sigma}{\lambda^2} \quad [5.7]$$

reemplazando la ec. (5.5), en la ec.(5.7), obtenemos:

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

Así, a velocidad de crecimiento del grano es:

$$\frac{dR}{dt} \propto \frac{2\sigma}{R} - (36\pi)^{\frac{1}{3}} \frac{\Sigma}{d} f^{\frac{2}{3}} \quad [5.8]$$

La ec.(5.8) puede ser reescrita de la forma:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\mu}{R} - Z \quad [5.8.1]$$

con μ y Z constantes tales que:

$$\mu \propto 2\sigma \quad [5.9]$$

$$Z \propto \frac{f^{\frac{2}{3}}}{d} \quad [5.9.1]$$

Volviendo al sistema monofásico, tenemos que la velocidad de crecimiento de grano esta dada por la ec.(5.4.1), integrando esa ecuación, obtenemos:

$$\frac{R^2 - R_0^2}{2\mu} = t \quad [5.10]$$

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 termino que disminuya la velocidad con respecto a la velocidad del sistema monofásico.

Como la velocidad de crecimiento de grano para un sistema bifásico esta dada por la ec.(5.8.1), integrando obtenemos:

$$\frac{R_0 - R}{Z} + \frac{\mu}{Z^2} \ln\left(\frac{\mu - ZR_0}{\mu - ZR}\right) = t \quad [5.11]$$

De la ec. (5.8.1) vemos que la velocidad de crecimiento debe ser mayor o igual que cero, luego:

$$\frac{\mu}{R} - Z \geq 0 \Rightarrow R \leq \frac{\mu}{Z} \quad [5.12]$$

5.3. RESULTADOS Y DISCUSION

Utilizando estos modelos, sintetizado en la ec.(5.10) para sistemas monofásicos y en la ec.(5.11) para sistemas bifásicos, se realizaron distintas simulaciones:

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 (5.10), con lo cual se estimo 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.(5.11) 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 5.3.

Caso 3: se simula un sistema bifásico con un tamaño de grano inicial $R_0 = 10,5$ 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 ec.(5.11) para un con $\mu = 1,5$; Con lo cual se estimo el Z correspondiente para cada tamaño de partícula de segunda fase. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 5.4.

Es importante notar que los valores de Z obtenidos, a través del ajuste de los resultados, por medio de la ecuación (5.11), aplicados a la ecuación (5.12), 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 5.5 se muestra la variación de Z con la fracción de partícula de segunda fase. Del análisis de los resultados, indicados en la Fig.5.5, se puede concluir que $Z \propto f^{0,63}$, lo cual esta en acuerdo con la ecuación (5.9.1).

En la figura 5.6 se muestra la variación de Z con el tamaño de la partícula de segunda fase. Del análisis de los resultados, se puede concluir que $Z \propto d^{-0,9}$ lo cual esta en acuerdo con la ecuación (5.9.1).

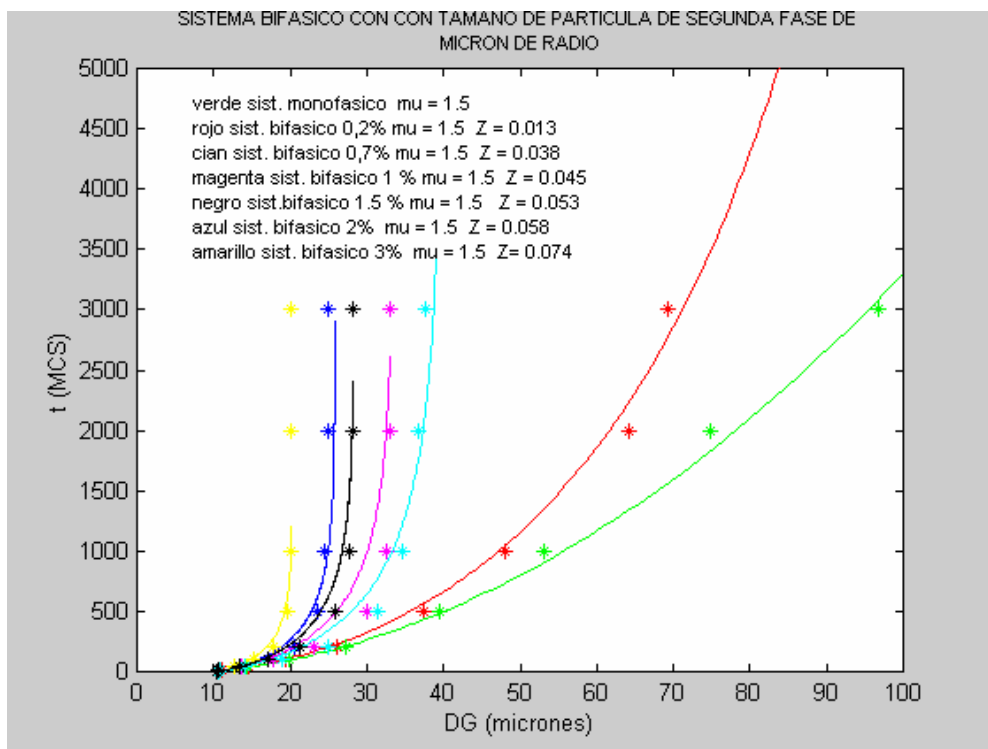


Figura 5.3: Crecimiento de grano versus tiempo en un sistema bifásico, para distintas fracciones de volumen de partículas de segunda fase. Las líneas corresponden al mejor ajuste obtenido por la ec.(5.11)

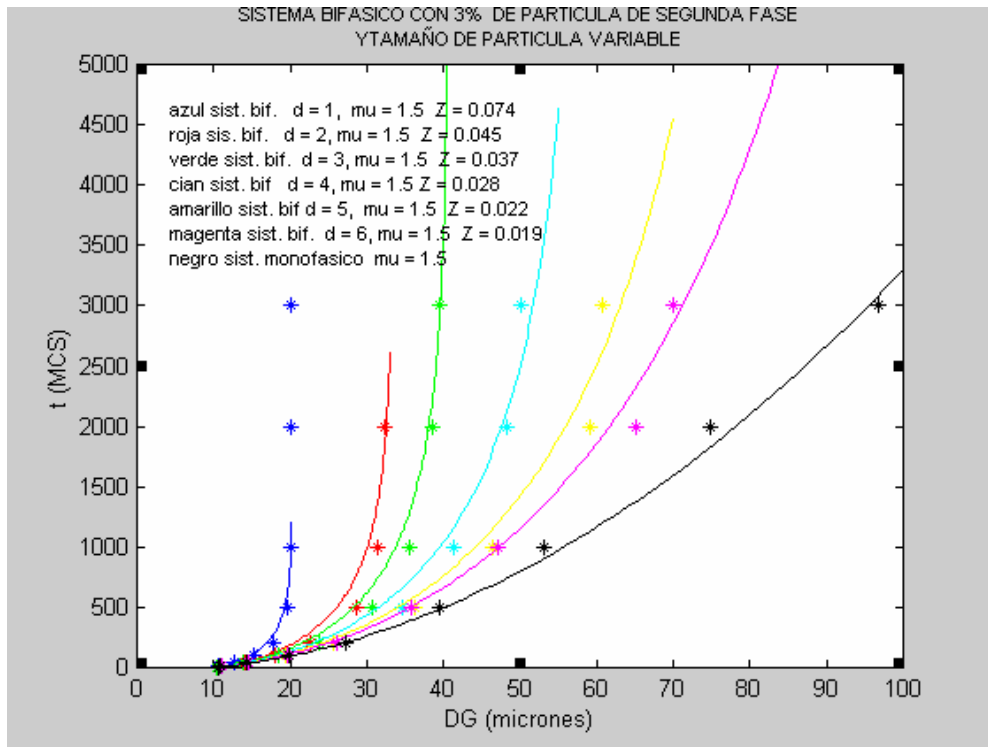


Figura 5.4: Crecimiento de grano versus tiempo en un sistema bifásico, para distintos tamaños de partículas de segunda fase. Las líneas corresponden al mejor ajuste obtenido por la ec.(5.11)

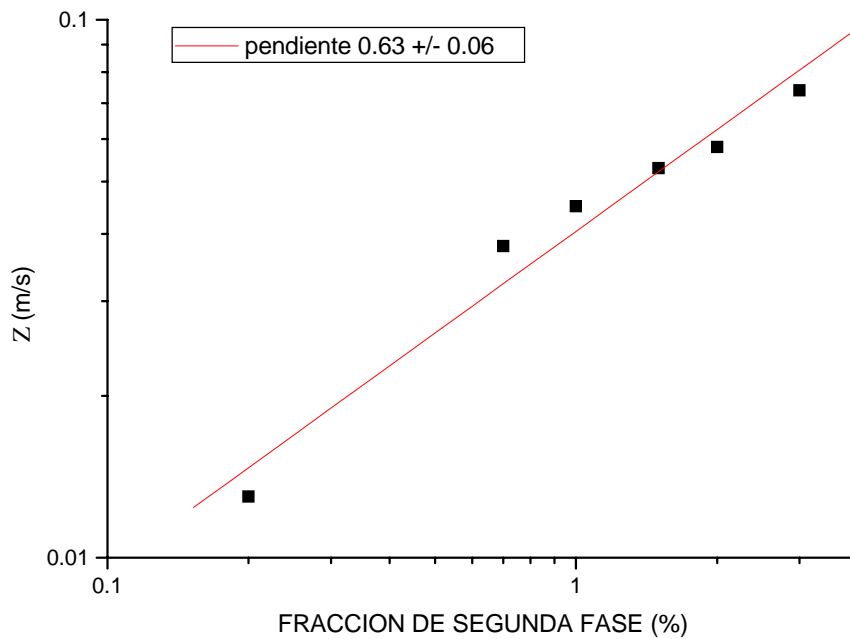


Figura 5.5: Variación de Z en función de la fracción de partículas de segunda fase, según la ec.(5.9.1)

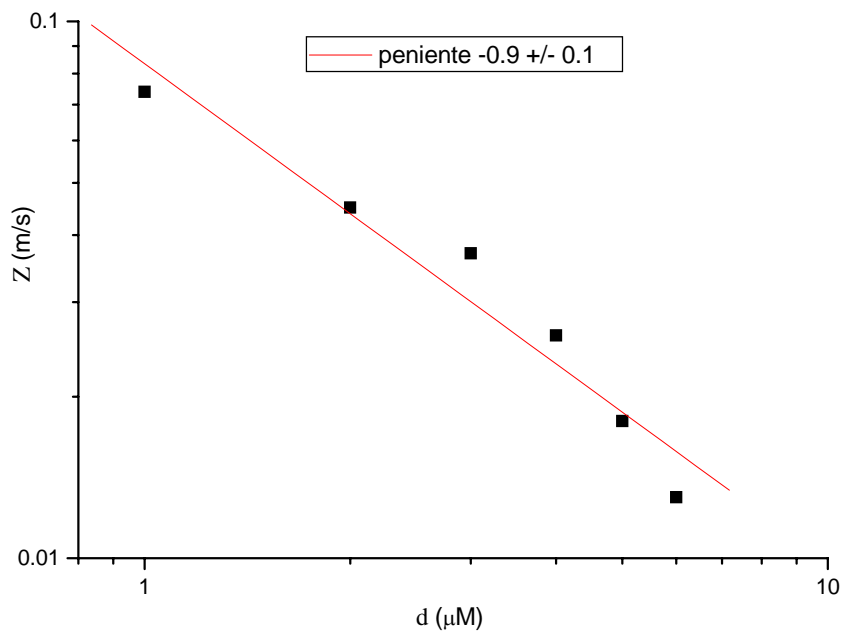


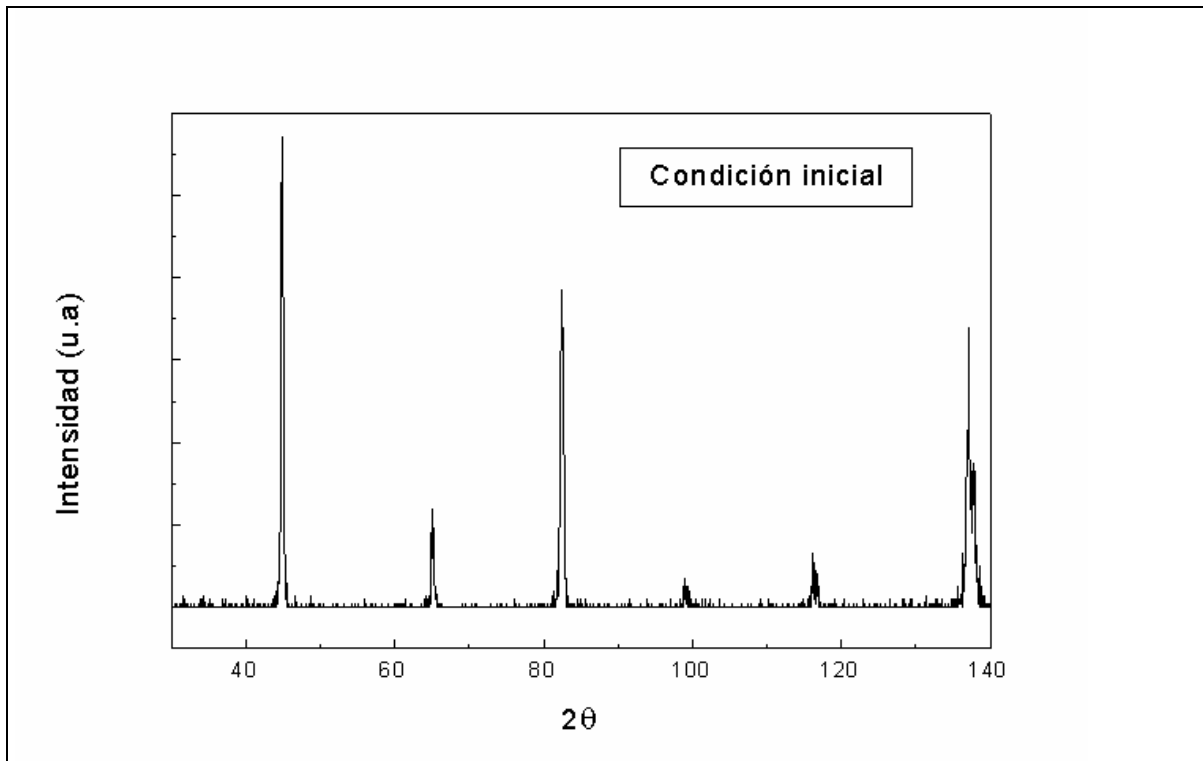
Figura 5.6: Variación de Z en función del tamaño de partículas de segunda fase, según la ec.(5.9.1)

REFERENCIAS CAPÍTULO V

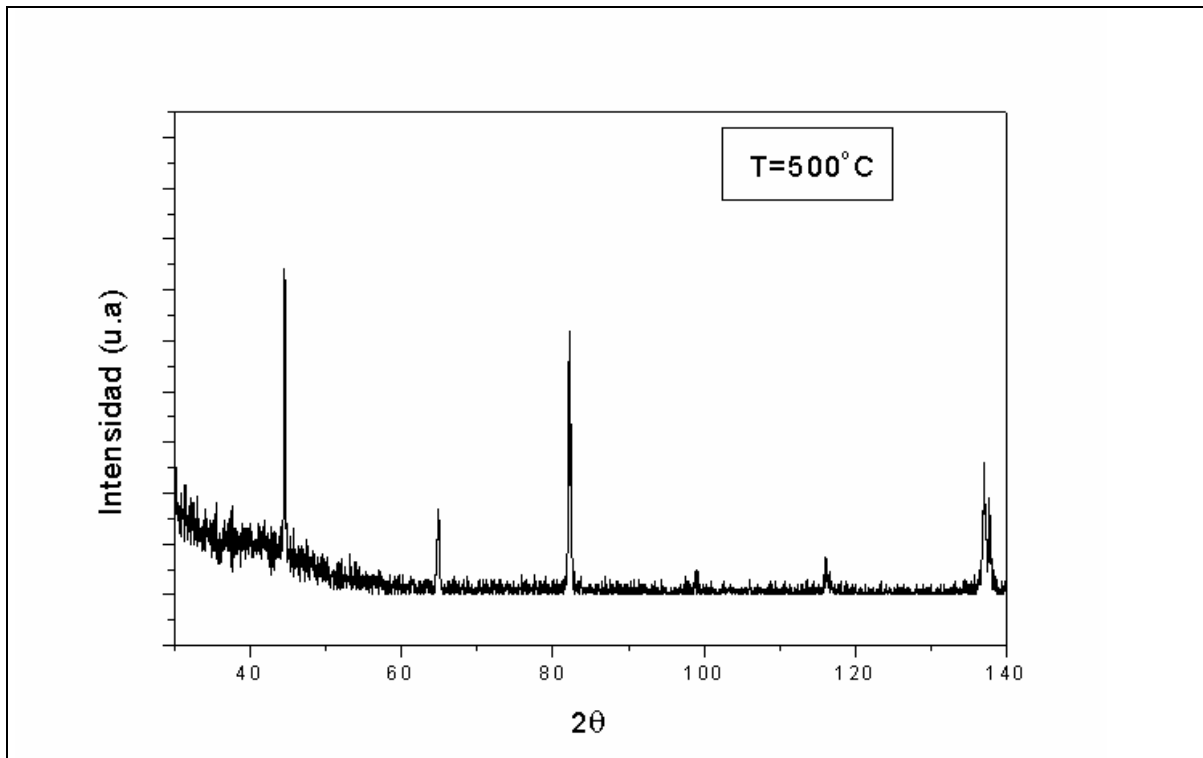
¹ Beck, P.A., Kramar, J.C., Demer, L.J. and Holzworth, M.L. Trans. Met. Soc. A.I.M.E., 175, 372 (1948)

ANEXO 1

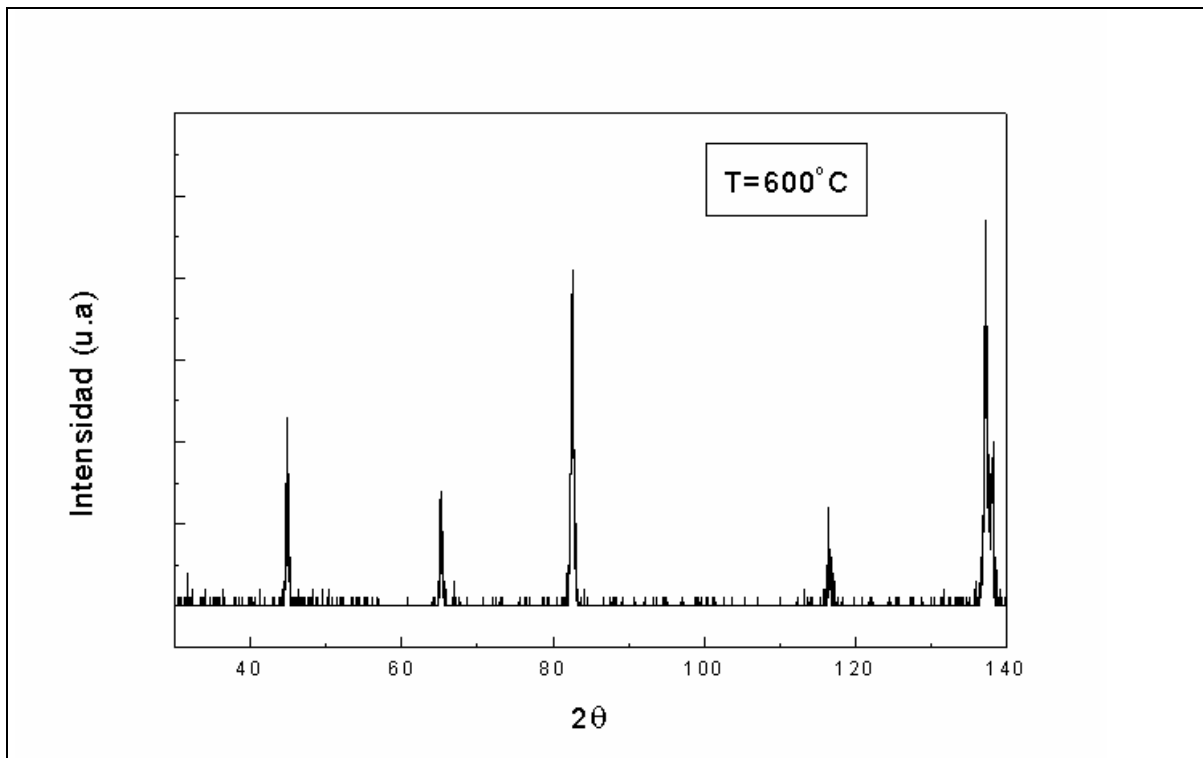
Diagramas de rayos X obtenidos a distintas temperaturas y tiempos de envejecido



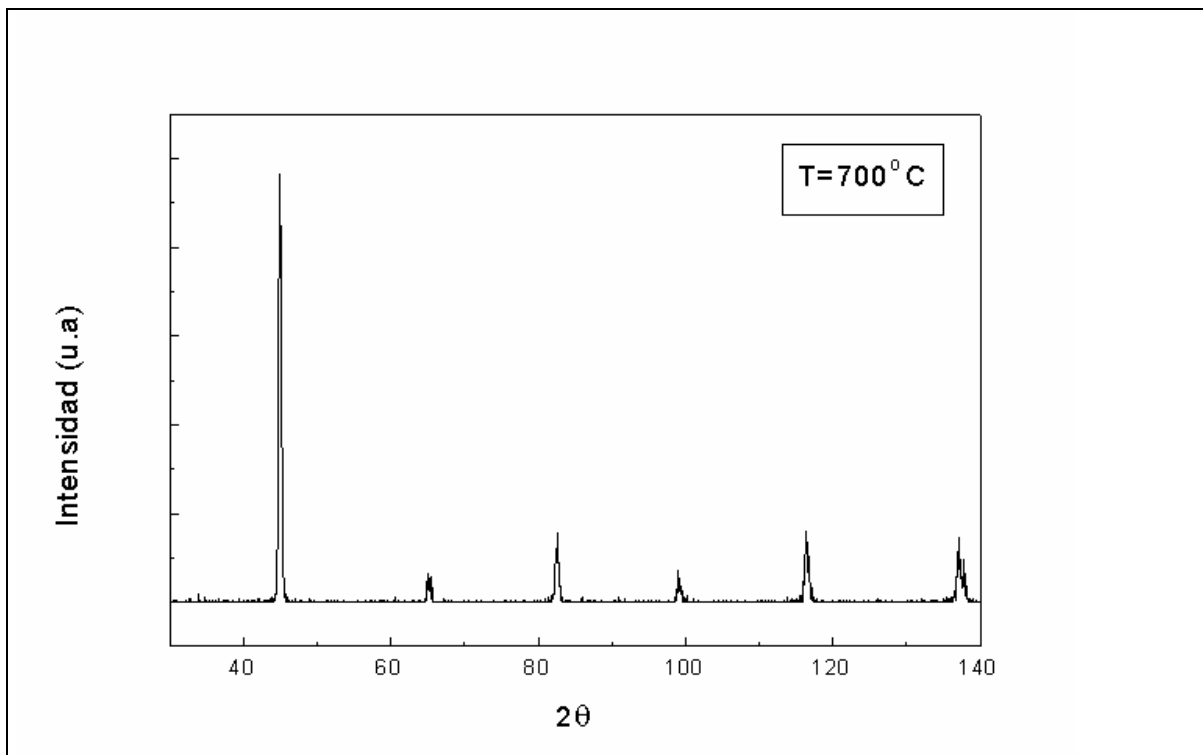
Difractograma del acero en condición inicial, (AR)



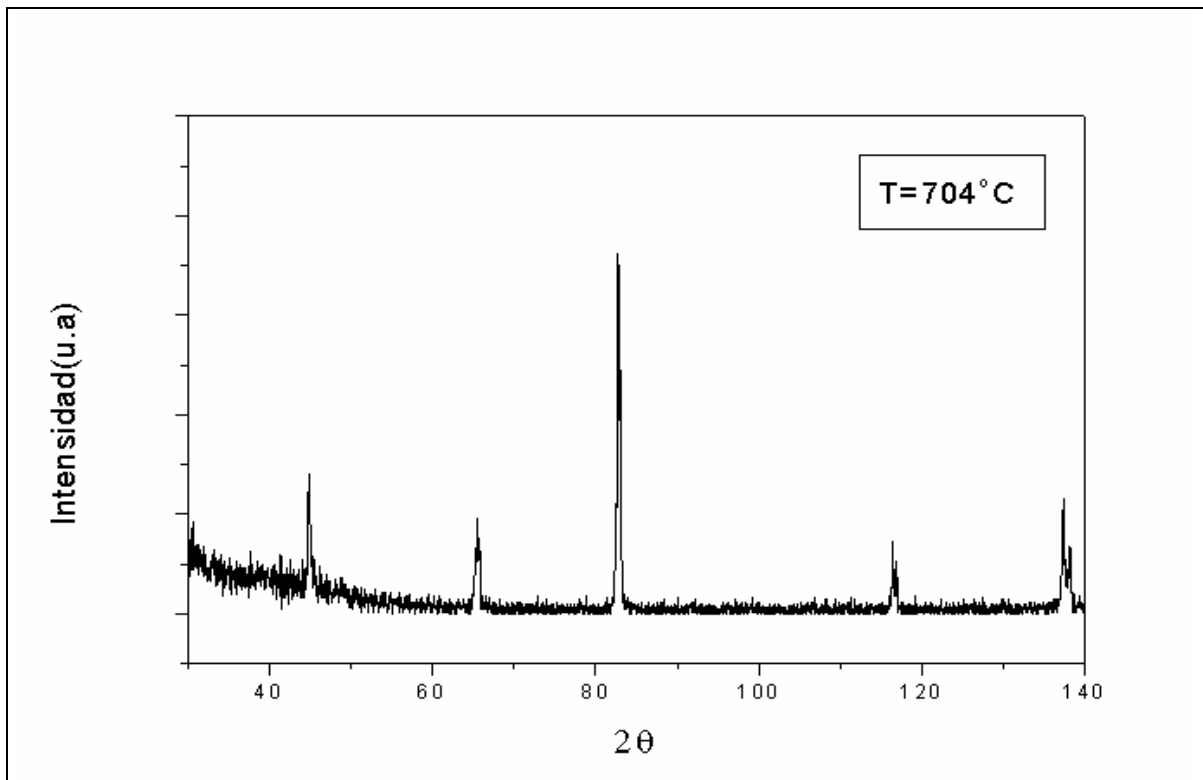
Difractograma de la muestra calentada hasta 500°C.



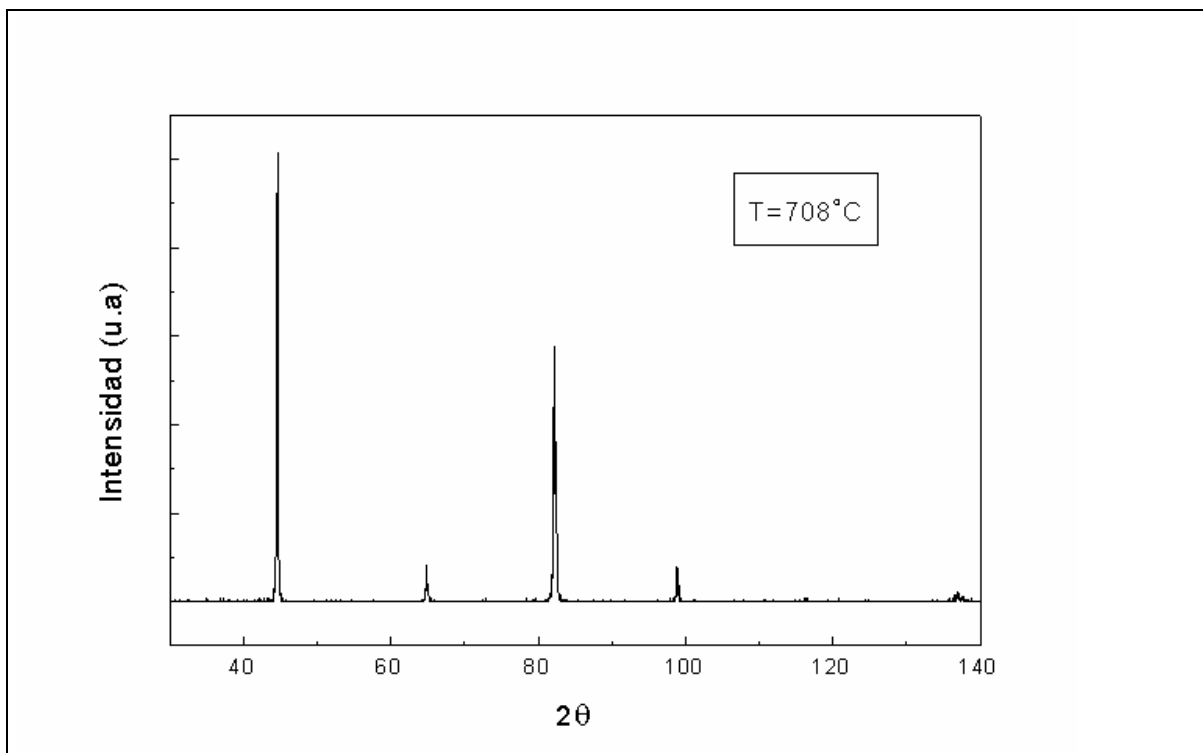
Difractograma de la muestra calentada hasta 600°C.



Difractograma de la muestra calentada hasta 700°C.



Difractograma de la muestra calentada hasta 700°C, y envejecida a esa temperatura 1h

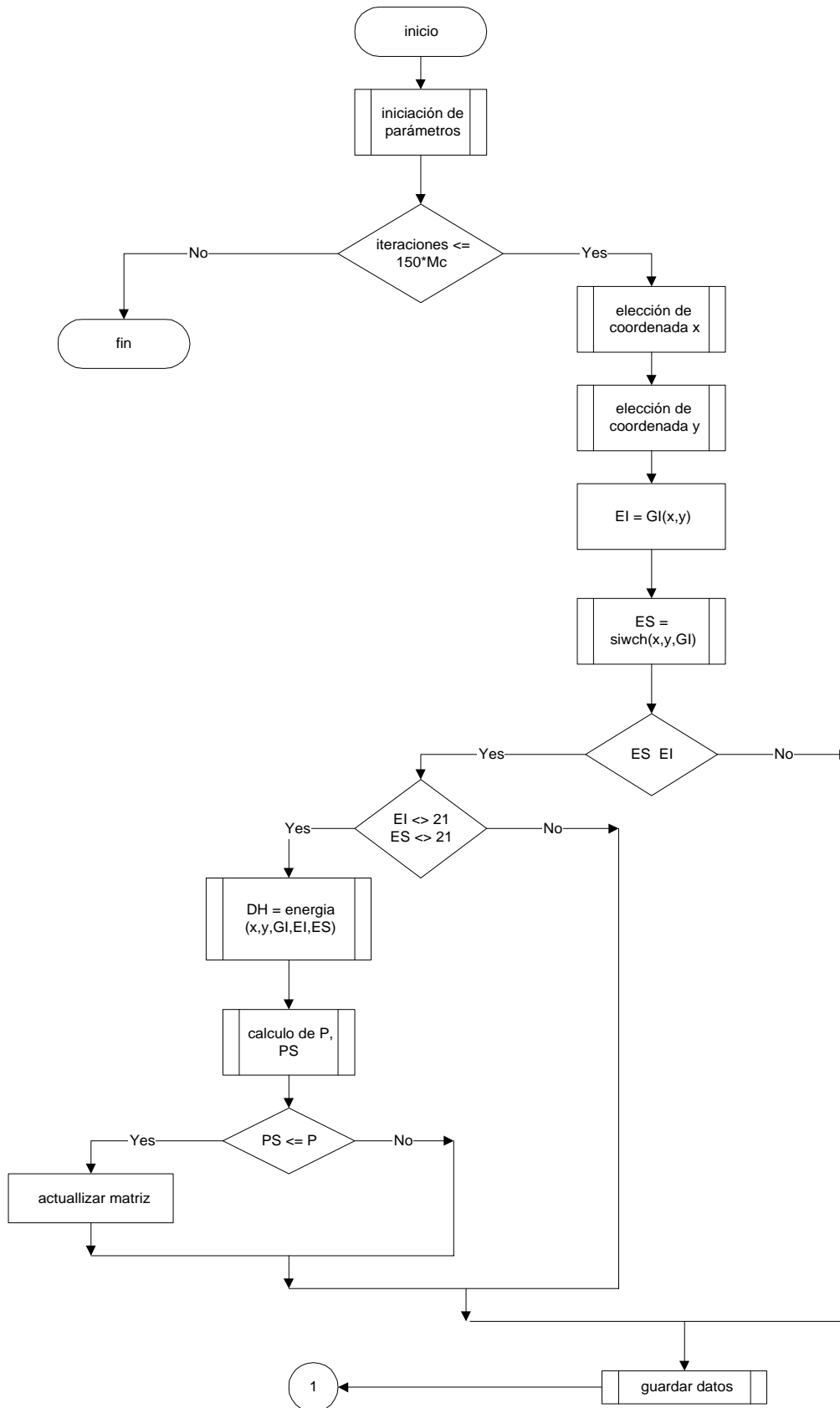


Difractograma de la muestra calentada hasta 700°C, y envejecida a esa temperatura 2 h.

ANEXO 2

Diagramas de Flujo

Diagrama de flujo del programa troncal



Diagramas de flujo de las subrutinas

