

CÁLCULO DA PROBABILIDADE DE UMA ORIENTAÇÃO DADA FORMAR CONTORNOS ESPECIAIS NUMA MATRIZ POLICRISTALINA ¹

*Alan Carvalho de Assis
Ciência da Computação – 8º Período
UnilesteMG ²*

*Carlos de Alvarenga Drumond
Engenharia de Materiais – 10º Período
UnilesteMG ³*

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma plataforma de aquisição de dados que são processados em software. Para tanto serão abordados os principais tópicos que envolveram este projeto. Primeiro faz-se uma introdução em cristalografia para mostrar a importância do estudo dessa ciência na engenharia. Em um segundo momento é mostrado o algoritmo desenvolvido e a aplicação do software, que foi desenvolvido em linguagem de programação “C”.

Palavras-chave: Cristalografia, engenharia de materiais, programação em linguagem “C”.

¹ Associação Brasileira de Metais – 5º Encontro Nacional de Estudante de Engenharia Metalúrgia e de Materiais - ENEMET, 25 a 29 de julho de 2005, Belo Horizonte/Ouro Preto

² Pesquisador do Laboratório Tempo Real (LTR) – UnilesteMG

³ Pesquisador do Núcleo de Pesquisa em Engenharia de Materiais (NUPEM) - UnilesteMG

INTRODUÇÃO

O trabalho tem por finalidade desenvolver um software para calcular a probabilidade de grãos de uma orientação dada formar contornos de grão especiais, do tipo CSL (rede de pontos de coincidência), numa matriz policristalina. O software deverá calcular as relações de orientação entre uma orientação dada (g^*) e as N orientações (g_i) dos grãos da matriz e retornar os valores das matrizes desorientação, expressando as relações de orientação em termos de eixos e ângulos de rotação, d_1 , d_2 , d_3 e ω . Os resultados assim obtidos são comparados com os eixos e ângulos de rotação dos contornos especiais, dentro de uma tolerância preestabelecida.

O aço silício de grão orientado é utilizado na fabricação de transformadores de distribuição e transformadores de força. É produzido por poucas empresas no mundo em função da sofisticada tecnologia de produção. O Brasil, além de ser um dos poucos países produtores, conta com importantes empresas produtoras de transformadores, algumas delas multinacionais. A principal referência deste projeto foi o mercado de tecnologia nacional de produção de aço silício de grão orientado. Isto quer dizer que se buscou neste trabalho mostrar a importância da tecnológica do aço silício de grão orientado, ver figura 1, cuja aplicação requer forte orientação preferencial, ou textura, que é obtida por recristalização secundária. A demanda por maior eficiência dos equipamentos elétricos leva a uma busca contínua de melhoria dos aços 3%Si, utilizados na construção dos núcleos de transformadores. Significativa parcela da perda de potência dos transformadores é devido à perda de potência no processo de magnetização do núcleo. Os núcleos na recristalização secundária do aço silício são grãos com orientação de Goss ou (110) [001], existentes na estrutura primária. A teoria de crescimento seletivo tem sido investigada recentemente e se baseia no princípio de que contornos de grãos especiais de alta mobilidade separam os núcleos de Goss dos grãos vizinhos e são consumidos rapidamente na recristalização secundária, alimentando o crescimento dos grãos com orientação de Goss. Uma importante forma de redução da perda de potência no núcleo é a melhoria da orientação preferencial ou textura cristalográfica do aço silício. Este trabalho vem contribuir para o estudo dos mecanismos envolvidos na recristalização secundária, fenômeno responsável pelo desenvolvimento da textura.

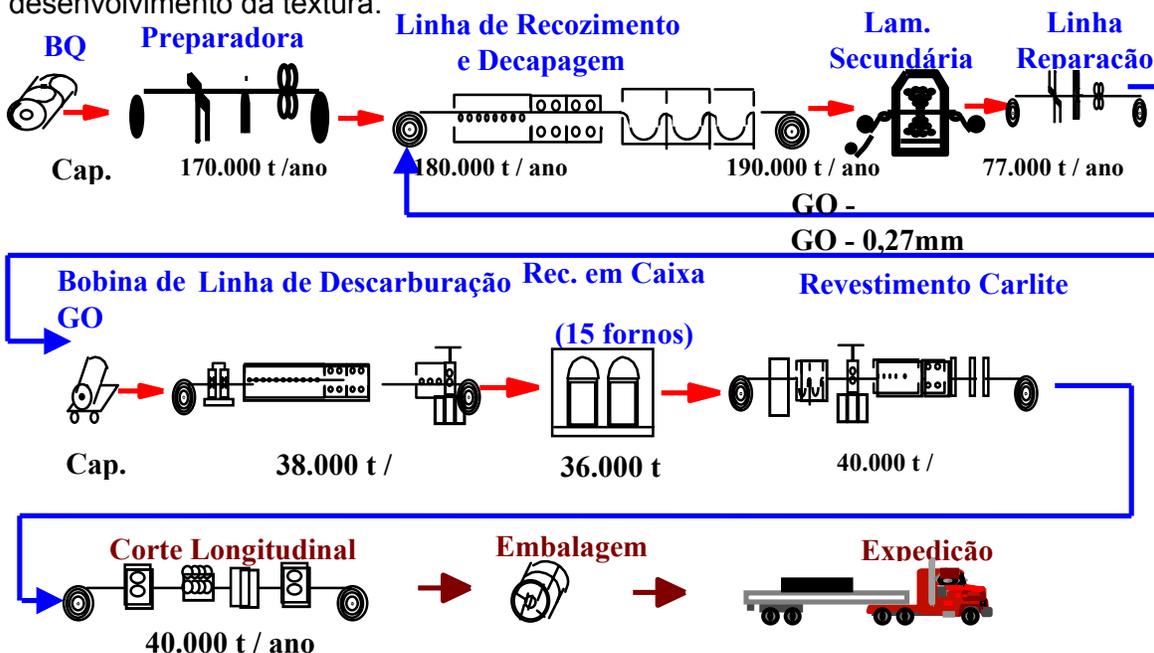


FIGURA 1 Fluxo de Produção de Aço Silício de Grão Orientado

MATERIAIS e MÉTODOS

Aço ao Silício

Aços elétricos são materiais magneticamente macios usados como núcleos de equipamentos para geração, distribuição e utilização de energia elétrica. Os aços elétricos não conduzem corrente elétrica, mas sim fluxo magnético que circula no núcleo dos equipamentos como geradores de energia, transformadores, motores elétricos, etc. Embora os equipamentos elétricos possuam uma alta eficiência, as perdas totais que ocorrem representam um desperdício de energia, hoje fator econômico muito relevante. A perda magnética no núcleo composto por aços elétricos representa parte importante das perdas totais, causando não somente desperdício de energia, como também má performance dos equipamentos elétricos, constituindo-se em um item de grande importância comercial. O aço ao silício é uma liga de ferro e carbono contendo o silício como principal elemento de liga. Os aços ao silício possuem teores desse elemento que variam entre 1,8% e 3,5%, dependendo do tipo de aço. A presença de silício aumenta a resistividade elétrica do aço e diminui as perdas magnéticas. Os aços elétricos semiprocessados são produzidos sem tratamento térmico para desenvolvimento das propriedades magnéticas finais. Tais propriedades magnéticas são obtidas após um tratamento térmico a ser realizado pelo usuário final. Nos aços elétricos totalmente processados as propriedades magnéticas são totalmente desenvolvidas pela usina siderúrgica. Tais aços apresentam algum tipo de revestimento isolante, sendo fornecidos prontos para serem utilizados sem a necessidade da realização de qualquer tratamento térmico adicional para o desenvolvimento das propriedades magnéticas. A principal diferença entre os aços GO e GNO está na estrutura cristalográfica de ambos. O aço ao silício GO apresenta uma textura pronunciada, chamada textura de Goss, cujos cristais apresentam a direção de mais fácil magnetização (direção [001] aresta do cubo) paralela à direção de laminação e o plano diagonal do cubo (110) paralelo ao plano da chapa, ver figura 2. Esta característica do GO lhe confere excelentes propriedades magnéticas na direção de laminação da chapa e o torna adequado para uso em núcleos estáticos onde o fluxo magnético coincide com a direção de laminação, como no caso dos transformadores, ver figura 3.

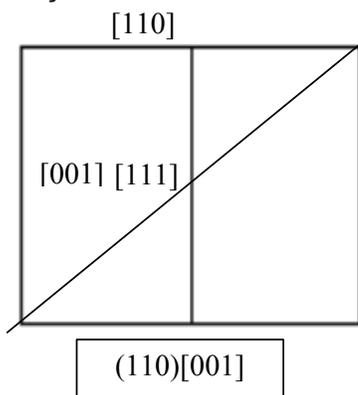


FIGURA 2 Orientação Preferencial

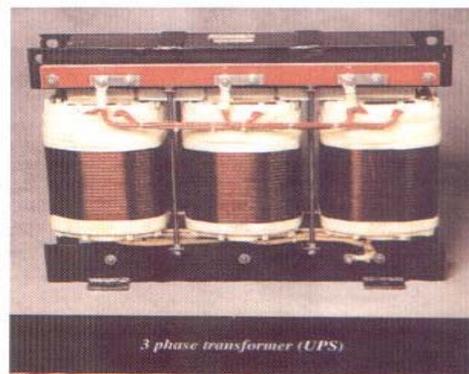


FIGURA 3 Transformador

DL - Direção de Laminação
DT - Direção Transversal
DN - Direção Normal no Plano da Chapa

O grão não orientado (GNO) não apresenta uma textura pronunciada e apresenta valores de propriedades magnéticas parecidas, ver figura 4, em todas as direções do plano da chapa, o que o faz adequado para uso em máquinas onde o fluxo magnético muda de direção, tais como motores elétricos e geradores de energia.

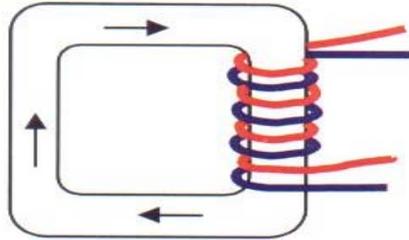


FIGURA 4 Fluxo Magnético no Transformador

Orientação Preferencial

Em função do grau de orientação preferencial obtido no processo, os aços de grão orientado que possuem tamanho médio de grão superior a 3 mm, ver figura 5, são classificados em aços regulares, (aproximadamente 7° de desvio da orientação ideal), e super-orientados, (3° de desvio da orientação ideal). Como a textura ideal (110) [001], ver figura 6 contém as direções [110]||DT e [111], a 54,7° com DL, que são direções de difícil magnetização, as chapas de aço silício de grão orientado apresentam forte anisotropia³ das propriedades magnéticas no plano de laminação.

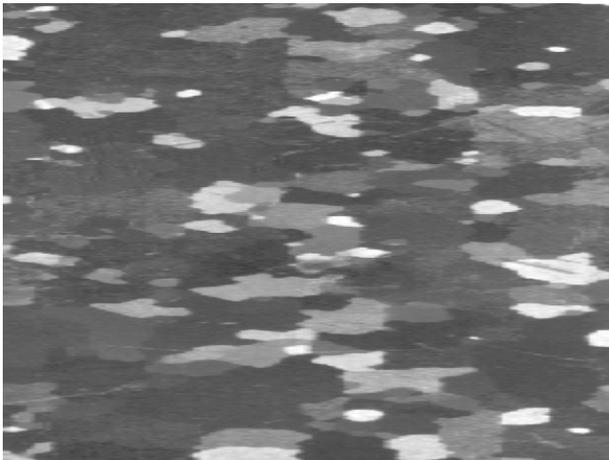


FIGURA 5 Tamanho Médio de Grão

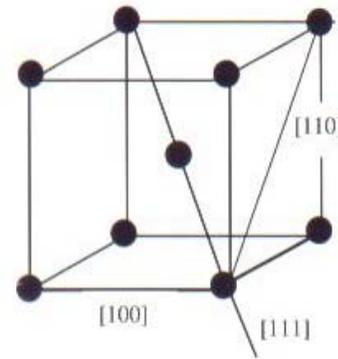


FIGURA 6 Direção Cristalográfica

Recristalização Secundária

Para que ocorra recristalização secundária o crescimento de grão normal tem que ser inibido. Em algumas circunstâncias uma estrutura recristalizada pode tornar-se instável e alguns grãos crescerem excessivamente consumindo os grãos recristalizados. Este processo é conhecido como crescimento anormal de grão ou recristalização secundária. A força motriz para o crescimento anormal de grão é normalmente a mesma do crescimento normal: redução da energia de contorno de

³ Condição de variabilidade de propriedades físicas de um material segundo direções.

grão. Para que ocorra recristalização secundária o crescimento de grão normal tem que ser inibido. Os principais fatores que inibem o crescimento normal de grão e levam ao crescimento anormal de grão são:

- ⊗ partículas de segunda fase;
- ⊗ textura;
- ⊗ efeito da superfície.

A recristalização secundária não ocorre numa estrutura ideal⁵, pois um grão muito grande tende a crescer mais devagar que o grão médio, através da teoria de Hillert, (Hillert, 1965), obtém-se que a velocidade de migração de um contorno de raio R, numa matriz de raio médio \bar{R} é inversamente proporcional ao seu raio de curvatura, conforme formula abaixo.

$$\frac{dR}{dt} = c^M Y_b \left(\frac{1}{R_{crit}} - \frac{1}{R} \right) \quad R_{crit} = \bar{R} \quad \left(\frac{d\bar{R}}{dt} \right) = \frac{(c^M Y_b)}{(4(\bar{R}))}$$

A taxa de crescimento de um grão grande com relação ao grão médio, com raio \bar{R} é dada por:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{R}{\bar{R}} \right) = \frac{1}{R^2} \left(\bar{R} \frac{dR}{dt} - R \frac{d\bar{R}}{dt} \right) > 0 \quad \left(\bar{R} \frac{dR}{dt} - R \frac{d\bar{R}}{dt} \right) > 0$$

Assim, pode-se mostrar que a condição para o crescimento anormal de grão nunca é satisfeita.

O efeito de partículas de crescimento anormal pode ser consequência da recristalização secundária numa liga em que o crescimento normal de grão tenha sido estagnado pelo efeito de uma dispersão de partículas. A nucleação⁶ é o fator crítico, principalmente nas ligas contendo grande fração volumétrica de partículas. Os núcleos para recristalização secundária são grãos da matriz que tendem a crescer preferencialmente, satisfazendo às condições anormais.

Numa estrutura estabilizada por partículas de raio r e fração volumétrica f_v , com diâmetro médio de grão D_m , a pressão para migração de uma interface plana, de raio infinito, é dada por.

$$P_m = 3 \frac{Y_b}{D_M} \text{ (interface plana: } R_a = \infty \text{)}$$

A pressão de ancoramento, exercida pelas partículas é:

$$P_z = 3F_v \frac{Y_b}{2r}, \text{ onde } F_v \text{ é a fração volumétrica;}$$

r e o raio médio das partículas e Y_b desvio médio de contorno de grão.

A condição de crescimento anormal é, $P_m > P_z$

$$D_M \leq 2 \frac{r}{F_v}$$

⁵ Contornos de grão isentos de impurezas e energia de contorno de grão constante.

⁶ Formação de núcleos estáveis no fundido.

Para um contorno de raio R_a finito a condição de crescimento é dada por:

$$P_m > P_z + c \frac{Y_b}{R_a} \text{ ou } D_M \leq 2 \frac{r}{F_V} \left(1 - \frac{2c}{3x} \right)$$

$$\text{onde } X = 2R_a / D_M$$

O gráfico 1 abaixo mostra condições de crescimento para interface plana (acima da curva não ocorre migração da interface e abaixo sim), e para dois valores de X. É mostrado também o tamanho de grão estabilizado por partículas, dado por:

$$D_{ZC} = \beta \frac{r}{F_V^{1/3}}, \text{ onde } \beta \text{ é constante}$$

Ocorrerá crescimento anormal quando o tamanho de grão estabilizado por partículas for menor que o tamanho de grão limite para crescimento anormal. Desta forma, o aumento da fração volumétrica pode também elevar a relação entre o diâmetro de grão para crescimento anormal ($2R_a$) e o diâmetro de grão médio da matriz, D_m .

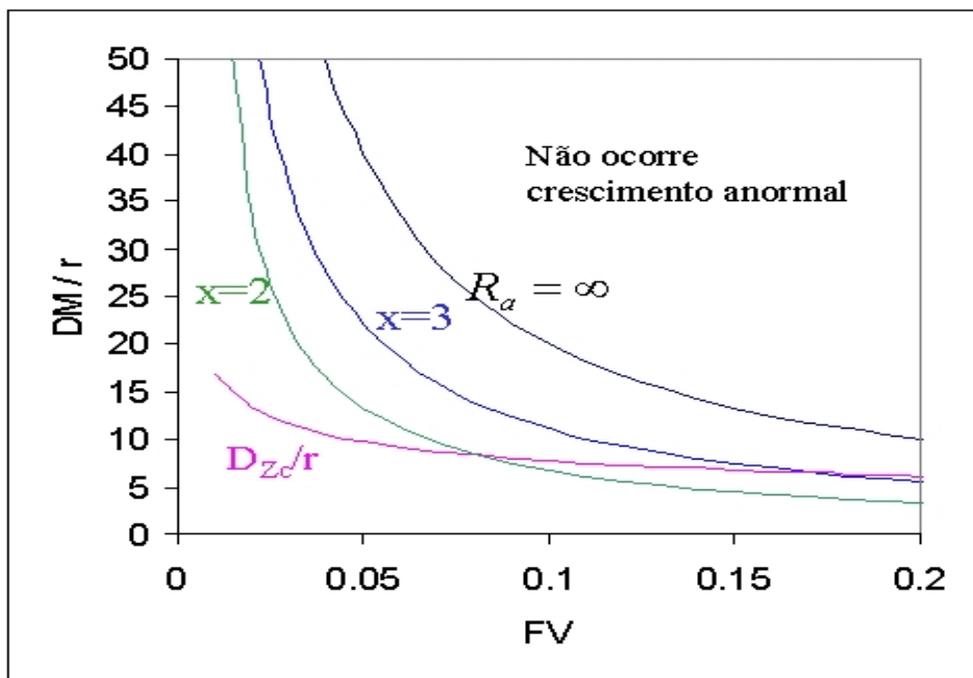


GRÁFICO 1 Efeito de Partículas

Tamanho Crítico de Grão

Existe, portanto, um tamanho de grão crítico para que ocorra o crescimento anormal. A força motriz para recristalização secundária é dada por:

$$P = AY_b \left(\frac{1}{R} - \frac{Y_a}{Y_b} R_a - Y_a \frac{Z}{Y_b} A \right) \text{ onde, } Z = \alpha \frac{F_V}{r}$$

é o fator de Guith-Zener γ_a/γ_b é a relação entre as energias de interface dos contornos que separam o grão secundário dos grãos da matriz (γ_a) e a energia de

interface entre os grãos da matriz (γ_b) sendo que o α é constante. O tamanho crítico de grão R_a é dado por:

$$\frac{R_a}{R} = \frac{\left(\frac{A Y_a}{Y_b} \right)}{\left(A - Z \bar{R} \frac{Y_a}{Y_b} \right)}$$

O tamanho crítico de grão cresce com relação γ_a/γ_b e com a pressão de ancoramento exercida pelas partículas. São fatores importantes:

- ⌘ Pressão de ancoramento exercida pelas partículas;
- ⌘ tamanho de grão médio da matriz, que em alguns sistemas pode ser maior que D_{zc} (é função da distribuição de partículas e dos processos termomecânicos);
- ⌘ textura primária.

Nucleação

A ocorrência da recristalização secundária pode ser limitada pela nucleação e não pelos fatores relativos ao crescimento de grão. Os núcleos na recristalização secundária do aço silício são grãos com orientação bem definida (110) [001], denominada orientação de Goss. O início do processo de recristalização secundária está associado à dissolução e coalescimento das partículas, com diminuição da pressão de ancoramento. Existem duas teorias que tentam explicar a recristalização secundária do aço silício:

- ⌘ modelo dos núcleos seletivos, com tamanho 2 a 3 vezes o tamanho médio de grão da matriz, proposto por Hillert (Hillert, 1965) ;
- ⌘ modelo do crescimento seletivo (Shimizu, Harase, 1988), devido a vantagem de mobilidade dos contornos de grão.

A nucleação seletiva seriam grãos com orientação de Goss, existentes na estrutura primária, com vantagem de tamanho em relação à matriz. Tais grãos seriam formados por coalescência de grãos vizinhos de orientação similar. Com a redução da pressão de ancoramento os contornos destes grãos seriam desbloqueados preferencialmente. Faltam evidências experimentais que confirmem esta teoria.

As teorias do crescimento seletivo têm sido investigadas recentemente e se baseiam no princípio de que contornos de grãos especiais de alta mobilidade separam os núcleos de Goss dos grãos vizinhos e são consumidos rapidamente na recristalização secundária. A teoria dos contornos tipo CSL diz que estes contornos de grão especiais de alta mobilidade são contornos do tipo CSL. A teoria dos contornos de alta energia diz que estes contornos são de alta energia, com desorientação de 20° a 45°. Trabalhos recentes sugerem outros contornos que têm maior importância.

Crescimento Seletivo – Teorias dos Contornos CSL:

Até a temperatura de início de recristalização secundária a força de ancoramento exercida pelas partículas de precipitado é alta e todos os contornos são estagnados. Sendo que essa força de ancoramento depende da natureza do

contorno de grão e os contornos CSL, especialmente $\Sigma 9$ e $\Sigma 5$, são contornos de baixa energia e por isso sofrem menor força de ancoramento. Na fase de incubação a força de ancoramento é reduzida pela dissolução e coalescimento das partículas, permitindo que os contornos CSL migrem em temperaturas mais baixas que os demais. Quanto menor o desvio em relação à orientação ideal (Σ) menor a temperatura de início de migração.

Em altas concentrações de elementos de liga e altas temperaturas os contornos de alta energia ($20^\circ - 45^\circ$) são os de mais alta mobilidade e são os contornos nos quais a taxa de coalescimento das partículas é mais alta. Conseqüentemente estes contornos são liberados para migrar mais cedo, iniciando o processo de recristalização secundária. A orientação preferencial da matriz, com predominância de grãos da fibra γ , favorece a formação de contornos de alta energia com os grãos de Goss.

RESULTADOS

Como se acredita que os grãos com orientação de Goss sejam aqueles com maior probabilidade de formação de contornos especiais ($\Sigma 9$ e $\Sigma 5$) com a matriz primária infere-se então que ocorre o crescimento destes grãos na recristalização secundária. Para verificar esta hipótese, é necessário calcular a probabilidade de uma dada orientação formar contornos especiais com uma matriz. As orientações dos grãos da matriz são obtidas por EBSD⁷ e expressas pelos ângulos de Euler (notação de Bunge), $g_i = g^*(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$. Para obter a probabilidade de uma dada orientação $g^* = g^*(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ formar contornos especiais com uma matriz, composta de N grãos, é necessário calcular a relação de orientação entre g^* e cada grão da matriz:

$$\Delta g_i = g^* * g_i^N \text{ onde } g^T \text{ é a matriz transposta de } g.$$

$$i = 1$$

Sabendo que a estrutura do aço ao silício tem uma dada orientação cúbica é como o cubo pode ter 24 orientações equivalentes, devido à simetria do sistema, as relações de orientação têm que ser calculadas para cada combinação das 24 orientações equivalentes g^* com as 24 orientações equivalentes de g_i , ou seja, 576 relações de orientação para cada um dos N grãos da matriz. As 24 variantes de uma orientação são obtidas aplicando-se pelas respectivas matrizes de transformação de coordenadas.

$$g_j = R_j * g^* \quad ; \quad g_{ik} = R_k * g_i$$

$$j = 1 \quad \quad \quad k = 1$$

A expressão geral da relação de orientação pode ser escrita como:

⁷ Difração de elétrons retroespalhados.

$$\begin{aligned}
 & i = N \\
 & 24 \quad T \\
 \Delta g_{ijk} &= g_j * g_{ik} \\
 & j = 1 \quad k = 1 \\
 & i = 1
 \end{aligned}$$

A relação de orientação Δg_i pode ser expressa pela direção cristalográfica comum a g^* e g_i (d) e pelo ângulo de rotação (ω), em torno desta direção, que leva à coincidência das duas redes:

$$\Delta g_i = \Delta g(\varpi, d_1, d_2, d_3)$$

Por convenção, a relação de orientação entre duas orientações g^* e g_i é expressa por aquela de menor rotação entre as 576 variantes Δg_{ijk} . Esta relação de orientação caracteriza o contorno de grão formado entre os grãos das orientações g^* e g_i . Os contornos especiais CSL já foram calculados e estão disponíveis na literatura. Os mesmos são descritos por (ϖ, d_1, d_2, d_3) . Assim, os valores calculados de Δg_i podem ser comparados com os valores ideais dos vários contornos CSL para verificar se são contornos especiais ou não. Para tal é necessário adotar uma tolerância. Neste trabalho será usado o critério de tolerância de Brandon et al, (Brandon, D.G., Ralph, B., Ranganatham, S., Wald, M.S., 1964):

↳ Tolerância em ω :

$\theta\omega = \theta_0(\Sigma)^{-1/2}$, onde $\theta_0 = 15^\circ$, que corresponde ao ponto de transição geralmente aceito entre contorno de baixo ângulo e contorno de alto ângulo.

- Tolerância no eixo (d_1, d_2, d_3);

$$\theta_d = 4\pi \left\{ 1 - \cos \left[\theta_0 (\Sigma)^{-1/2} \right] \right\}$$

Assim, para cada grão g_i da matriz será calculado o contorno que será formado com grão g^* e verificada a proximidade deste com os contornos CSL. Os contornos que forem considerados especiais serão computados de acordo com a categoria ($\Sigma 3, \Sigma 5, \Sigma 7, \Sigma 9, \dots$) e determinada a fração de cada categoria na matriz em exame. Os contornos com $\omega > 15^\circ$ e que não se enquadram na categoria de especiais são chamados contornos aleatórios. Será também computada a fração de contornos aleatórios, fazendo a soma das frações encontradas igual a 1. Serão considerados os contornos CSL de $\Sigma 1$ (quando $\omega \leq 15^\circ$) até $\Sigma 19\beta$.

Um exemplo de aplicação da análise pode ser vista no trabalho, comparando a análise de duas primárias com orientação resultante após recristalização secundária.

Podemos visualizar um resultado do programa abaixo:

Entre com os valores de **Fi₁**, **Fi** e **Fi₂**

Fi₁ = 90.000000;

Fi = 90.000000;

Fi₂ = 45.000000;

Digite a quantidade de grãos a ser processada: 1;

Entre com os valores de F_{i_1} , F_i e F_{i_2} para o 1º grão:

$F_{i_1} = 30$; $d_1 = 0.707$
 $F_i = 54,70$; $d_2 = 0.707$ Tipo do contorno: $\Sigma 9$
 $F_{i_2} = 45$; $d_3 = 0.0$

CONCLUSÃO

O trabalho desenvolvido pelos alunos é de relevância inquestionável do ponto de vista acadêmico quanto do ponto de vista sócio econômico. Do ponto de vista acadêmico foi que melhorou a didática da disciplina cristalografia, pois com o software pode-se ter maior compreensão da matéria haja visto que, ter os resultados das orientações dos grãos previamente possibilita para o estudante de engenharia e ciência dos materiais uma grande facilidade, além de demonstrar o quanto esse estudo é importante para o desenvolvimento tecnológico de aços 3%Si. Já do ponto de vista sócio econômico o trabalho torna-se único, pois o mesmo como já foi dito, desenvolveu uma parceria entre a Universidade é a Empresa produtora de aço silício da região do Vale do Aço, além de concentrar os investimentos dentro da própria cidade e/ou país. Isso faz com que não gerem riquezas para outros lugares possibilitando com isto o desenvolvimento e o aprimoramento com baixo custo. É isso que o torna de relevância tão grande, pois qualquer futuro profissional da área da engenharia deve ter em mente que o foco principal é manter o menor custo possível com a máxima qualidade, principalmente quando se consegue concentrar as riquezas da região dentro do seu próprio país.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1- Brandon, D.G, Ralph, B, Ranganatham, S, Wald, M.S, (1964), The Structure of High-Angle Boundaries, Acta Metall. 12, 813-820.
- 2- Hillert, M, (1965), in Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Hunphreys, F.J. Hatherly M., (1996), Pergamon, 497p.
- 3- Shimizu, R., Harase, J., Dingley, D.J., (1990), Prediction of Secondary Recrystallization Texture in Fe-3% Si by Three-Dimensional Texture Analysis, Acta Metall, Matter, 38, 6, 973-978.

ABSTRACT

This paper shows the development of an data acquisitions platform that is performed in software. This way it will be approached the main points that involved this project. In the beginning it makes importance of this scientific study in the engineering. After with the algorithmic development is showing the application of the software that was developed in C language program.

Key-words: Crystallography, engineer of materials, "C" language.