

MODELAGEM MATEMÁTICA DA RELAÇÃO ENTRE CONDUTIVIDADE ELÉTRICA E RESISTÊNCIA MECÂNICA DE LIGAS DE Cu-Cr EM SOLUÇÃO SÓLIDA SUBMETIDAS A DEFORMAÇÃO PLÁSTICA SEVERA*

João Vitor Baptista Salgado¹
Paulo Davi Borges Esteves¹
Eduardo Hoisler Sallet¹
Matheus da Silva Domingos¹
Ana Carolina Goulart de Andrade¹
Talita Gama de Sousa²
Luiz Paulo Mendonça Brandão³

Resumo

Determinadas aplicações de materiais na engenharia exigem uma alta condutividade elétrica e resistência mecânica dos mesmos. No presente trabalho, foi elaborada uma modelagem matemática do comportamento destas duas grandezas em ligas de Cu-Cr submetidas a deformação plástica severa com o intuito de determinar as condições ideais a fim de maximizá-las. A partir de dados obtidos em artigos científicos, foram feitos ajustes de curva de forma a modelar o comportamento dos materiais estudados. A partir das curvas ajustadas, foi estudado o efeito da adição de Cr em solução sólida ao Cu puro na condutividade elétrica e resistência mecânica da liga em questão. Sendo assim, foi elaborado um meio de determinar a concentração de Cr ideal na liga, que maximize as propriedades desejadas.

Palavras-chave: Alta resistência mecânica; Alta condutividade elétrica; Deformação plástica severa; Ligas de Cu-Cr

MATHEMATICAL MODELING OF THE RELATIONSHIP BETWEEN ELECTRICAL CONDUCTIVITY AND MECHANICAL STRENGTH OF Cu-Cr ALLOYS IN SOLID SOLUTION PROCESSED BY SEVERE PLASTIC DEFORMATION

Abstract

Certain applications for materials in engineering demand high electrical conductivity and mechanical strength of said materials. In this paper, a mathematical model for the behavior of these two properties in Cu-Cr alloys was developed, with the intent of determining the ideal conditions to maximize them. With data obtained from scientific papers, curve fits were made to model the behavior of the studied materials. Based on the curve fits, the effect of adding Cr in solid solution to pure Cu on the electrical conductivity and mechanical strength of said alloys was studied. Thus, a way to determine the ideal concentration of Cr in the alloy, maximizing both desired properties, was developed.

Keywords: High mechanical strength; High electrical conductivity; Severe plastic deformation; Cu-Cr alloys

¹ Graduando em Engenharia de Materiais, Seção de Engenharia Mecânica e de Materiais, Instituto Militar de Engenharia – IME, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

² Química, M.Sc., Doutoranda em Ciência dos Materiais no Instituto Militar de Engenharia – IME, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

³ Engenheiro Metalúrgico, D.Sc; Professor associado, Seção de Engenharia Mecânica e de Materiais, Instituto Militar de Engenharia – IME, Rio de Janeiro, RJ, Brasil..

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação e Objetivo do Trabalho

Com o avanço da engenharia, criou-se a necessidade do desenvolvimento de materiais com alta resistência mecânica e alta condutividade elétrica. Por serem propriedades inversamente proporcionais, o desenvolvimento e produção de tais materiais pode ser uma árdua tarefa. Corrêa [1] demonstra a importância e simultânea dificuldade da obtenção de materiais com tais características.

Ligas de Cu têm sido vastamente utilizadas com este fim. Através de deformação plástica severa, é possível alterar aspectos microestruturais do material como tamanho de grão e densidade de discordâncias, diminuindo a condutividade elétrica do material e aumentando sua resistência mecânica. Este fato foi explorado por Habibi [2], ao aplicar passes de ECAR (Equal Channel Angular Rolling) a Cu puro, e por Dobatkin [3], ao aplicar HPT (High Pressure Torsion) a uma liga de Cu-Cr com concentração de 0,75% de Cr em solução sólida.

Neste trabalho, os valores de condutividade elétrica e dureza dos materiais supracitados foram utilizados para elaboração de um modelo matemático que permite a determinação da concentração ótima de Cr na liga a fim de maximizar as propriedades de interesse.

1.2 Funções Logísticas

Uma função ou curva logística possui um formato em “S” com equação geral (Equação 1):

$$f(x) = \frac{a}{1 + e^{b \cdot (x-c)}} + d \quad (1)$$

onde ‘a’, ‘b’, ‘c’ e ‘d’ são constantes reais. A Figura 1 exibe uma função desta forma, onde é possível ver que se trata de uma curva com duas assíntotas. Para calcular o valor da função nas assíntotas, considerando-se $b > 0$, basta calcular os limites a seguir (Equações 2 e 3):

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) = d \quad (2)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = a + d \quad (3)$$

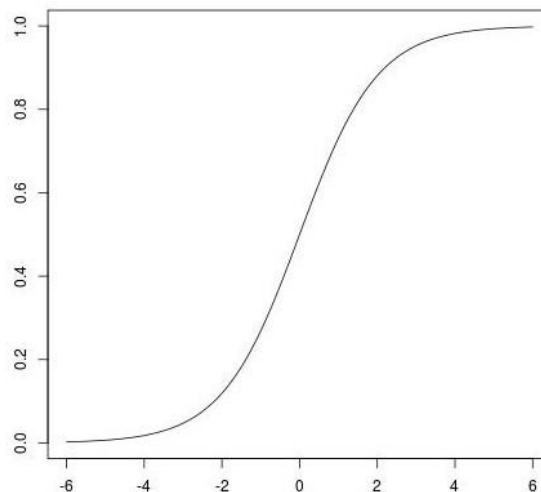


Figura 1. Exemplo de função logística.

Além disso, é possível demonstrar que a constante 'c' é o valor de x no ponto de inflexão da curva e a constante 'b' está relacionada à inclinação da curva.

Esta família de funções foi nomeada por Pierre François Verhulst, que a estudou aplicada a crescimento populacional, no qual o estágio de crescimento inicial é exponencial e então, quando inicia-se a saturação, a taxa de crescimento diminui gradativamente até que se atinja o equilíbrio.

1.3 Ajuste de Curva

O ajuste de uma curva consiste em um modelamento matemático que visa encontrar a função que melhor se ajusta a um conjunto de dados. Para tanto, pode ser utilizado o método dos mínimos quadrados, no qual tenta-se minimizar a soma dos quadrados dos resíduos da regressão.

O parâmetro que melhor indica a qualidade do ajuste é o coeficiente de determinação, também chamado de R^2 . Este coeficiente varia entre 0 e 1, sendo que um valor mais próximo de 1 significa um ajuste de melhor qualidade.

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 Materiais e Métodos

Para a elaboração do modelo matemático, foram utilizados dados experimentais de condutividade e microdureza provenientes de Habibi [2] e Dobatkin [3]. A partir dos dados, foram produzidos gráficos de microdureza (MPa) por condutividade (IACS%) e foi utilizada a ferramenta "Curve Fitting Toolbox" do software MATLAB para ajustar os parâmetros da equação escolhida.

2.2 Resultados e Discussões

Em Habibi [2], Cu puro comercial foi submetido à deformação plástica severa através de passes de ECAR. Este processo resultou em uma grande redução do tamanho de grão do material e aumento da densidade de discordâncias, conferindo maior dureza e diminuindo sua condutividade elétrica. As Figuras 2 e 3 apresentam os valores de microdureza (HV) por número de passes de ECAR e os valores de condutividade (IACS%) por número de passes de ECAR, respectivamente.

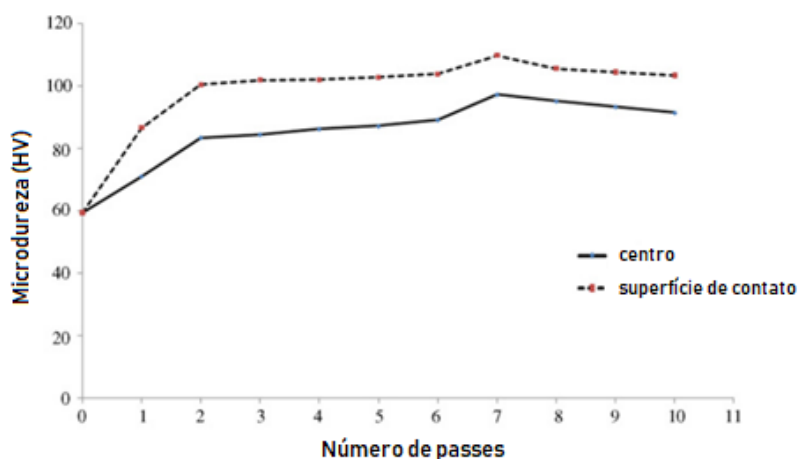


Figura 2. Variação da microdureza por número de passes de ECAR na superfície e centro das amostras (adaptação de HABIBI *et al.*, 2001).

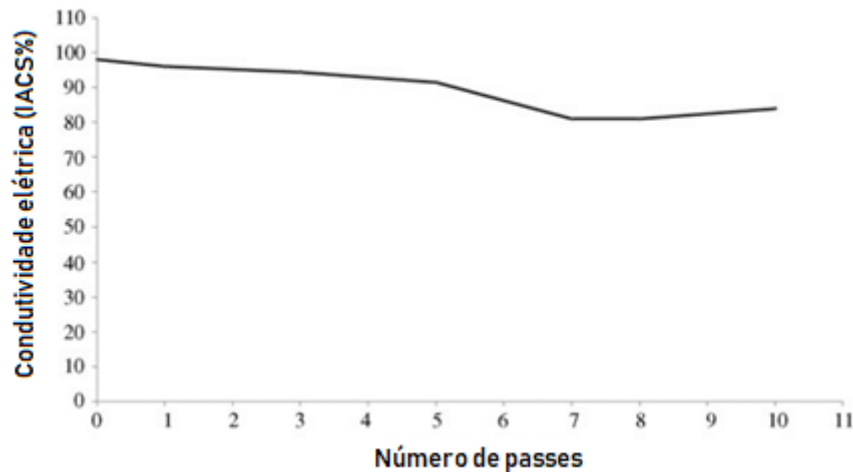


Figura 3. Variação da condutividade elétrica por número de passes de ECAR (adaptação de HABIBI *et al.*, 2001).

Foi então elaborado um gráfico de microdureza (MPa) por condutividade (IACS%), exibido na Figura 4. Fez-se uma conversão de unidades de HV para MPa por meio do fator multiplicativo 9,807 e os valores de microdureza no centro da amostra foram utilizados pelo fato de na superfície existirem tensões que podem interferir nos resultados das medidas.

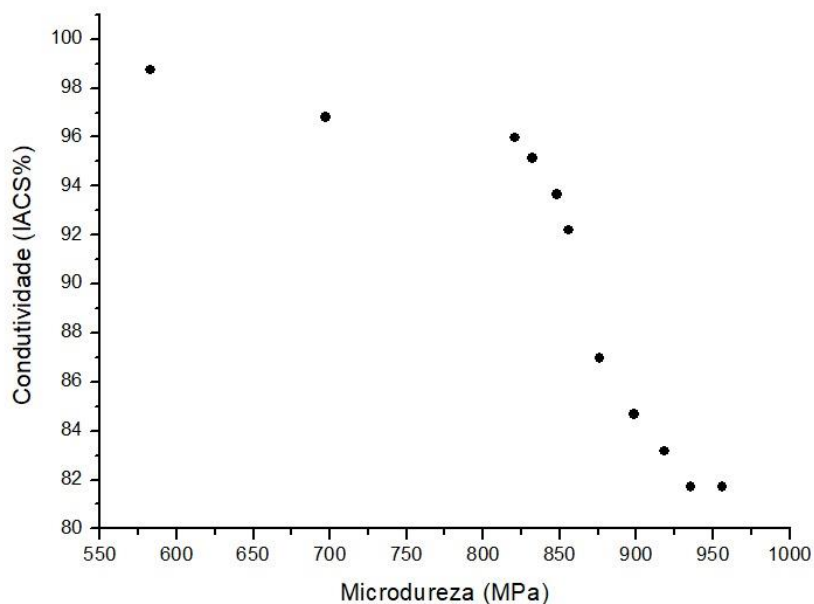


Figura 4. Variação da microdureza por condutividade elétrica.

Analisando os gráficos, observa-se que em certas etapas, com o aumento da deformação plástica, a condutividade elétrica aumenta de valor enquanto o valor da microdureza diminui. Isso pode ser explicado pelo fenômeno da recuperação dinâmica, abordado por Nes [4]. Com a saturação de discordâncias, a deformação plástica, em vez de aumentar a densidade de discordâncias no material, promove aniquilação mútua destas, recuperando o material. Pelo formato de curva que os pontos da Figura 3 sugerem, pelo fato de a condutividade elétrica do material ter de

ser limitada e por conta do efeito da saturação de discordâncias, fez-se um ajuste de curva com uma função logística no conjunto de dados obtidos. O resultado de tal ajuste está representado na Figura 5.

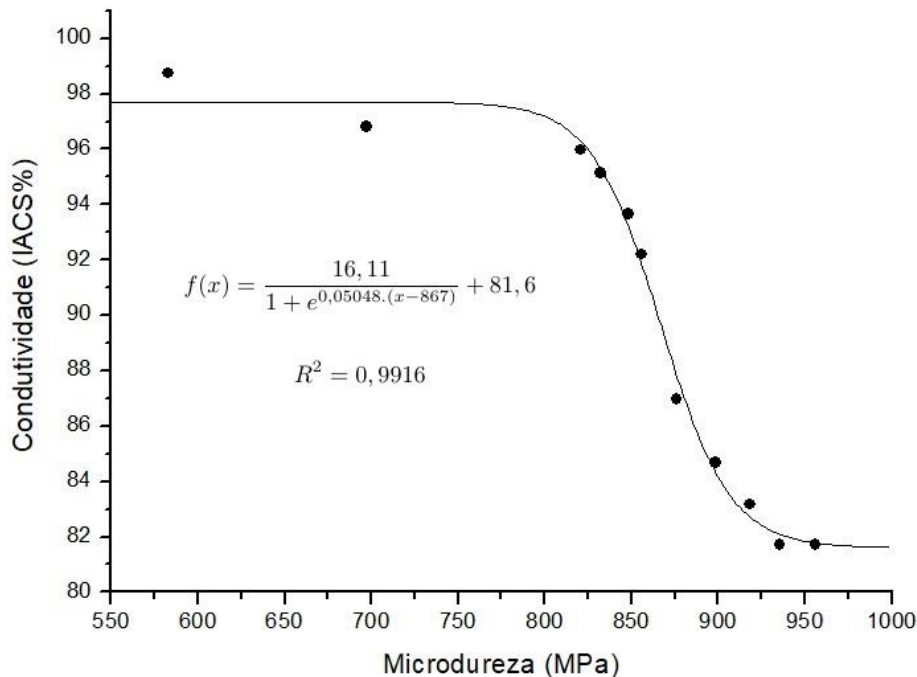


Figura 5. Gráfico da curva ajustada e parâmetros de ajuste.

O mesmo procedimento foi aplicado aos dados presentes em Dobatkin [3] com o intuito de verificar a aplicabilidade da função escolhida e avaliar o efeito da adição de Cr na liga nas propriedades estudadas. Nesse trabalho, ligas de Cu contendo 0,75%, 9,85% e 27% de Cr foram estudadas. As ligas contendo 0,75% e 9,85% de Cr foram submetidas a forjamento à 800 °C e posteriormente tratadas termicamente de duas maneiras diferentes: (i) recozimento à 1000 °C por 2 horas e resfriamento ao ar à temperatura ambiente e (ii) recozimento à 1000 °C por 2 horas e resfriamento em água à temperatura ambiente. As espécies processadas da primeira e segunda maneiras serão referidas como “recozidas” e “temperadas”, respectivamente. O resfriamento rápido das ligas temperadas provocou um maior aprisionamento de átomos de Cr na rede cristalina, enquanto que nas ligas recozidas houve intensa precipitação de Cr. A liga contendo 27% de Cr não sofreu tratamento posterior à fundição. Segundo Dobatkin [3], o limite de solubilidade do Cr em Cu é por volta de 0,75 p% à temperatura inicial do tratamento, portanto apenas a liga temperada com concentração de 0,75% Cr foi capaz de solubilizar todo o Cr presente, formando uma solução sólida. Todas as amostras foram então sujeitas a deformação plástica severa através de HPT. As amostras submetidas a HPT foram então tratadas termicamente em temperaturas variando de 50 °C à 600 °C, com passo de 50 °C e tempo de tratamento de 1h. As Figuras 6, 7 e 8 mostram os valores de microdureza (MPa) e condutividade (IACS%) por temperatura do tratamento térmico para as ligas com 0,75%, 9,85% e 27% Cr, respectivamente.

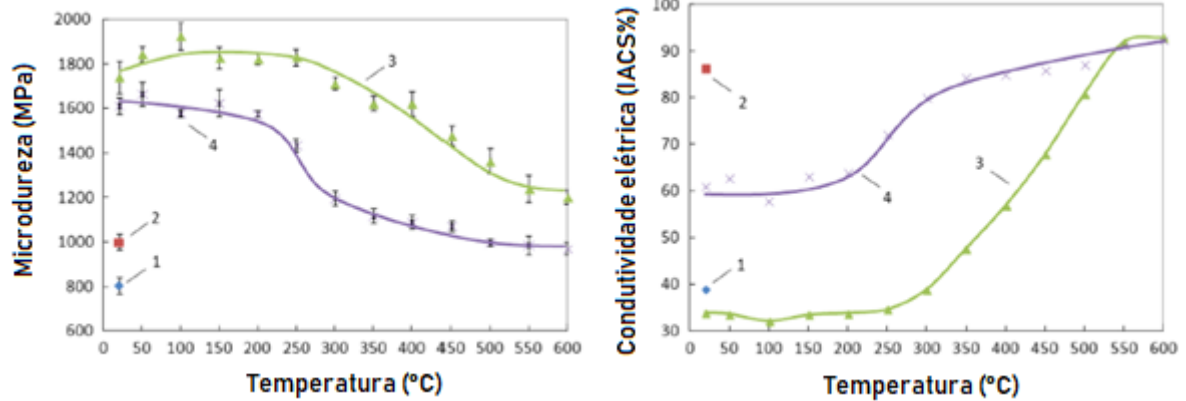


Figura 6. Gráficos de variação da microdureza e condutividade elétrica por temperatura do tratamento térmico nas ligas de 0,75% Cr (curva 3 – temperadas / curva 4 – recozidas) (adaptação de DOBATKIN *et al.*, 2014).

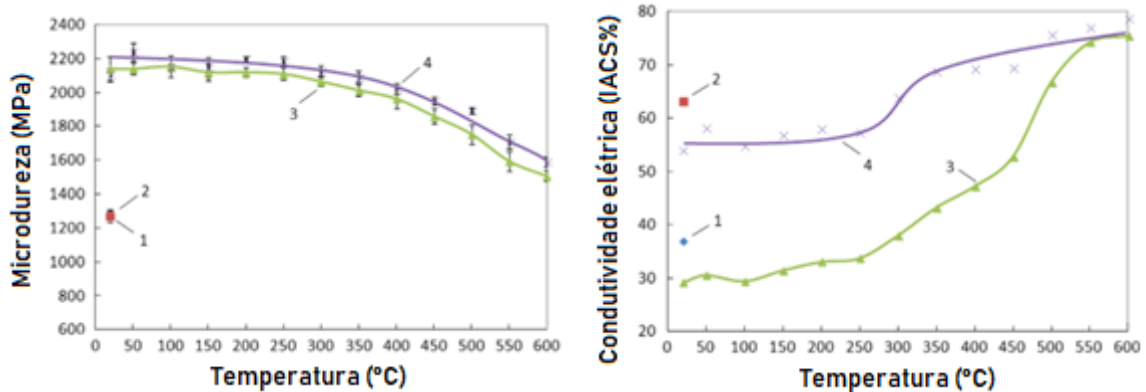


Figura 7. Gráficos de variação da microdureza e condutividade elétrica por temperatura do tratamento térmico nas ligas de 9,85% Cr (curva 3 – temperadas / curva 4 – recozidas) (adaptação de DOBATKIN *et al.*, 2014).

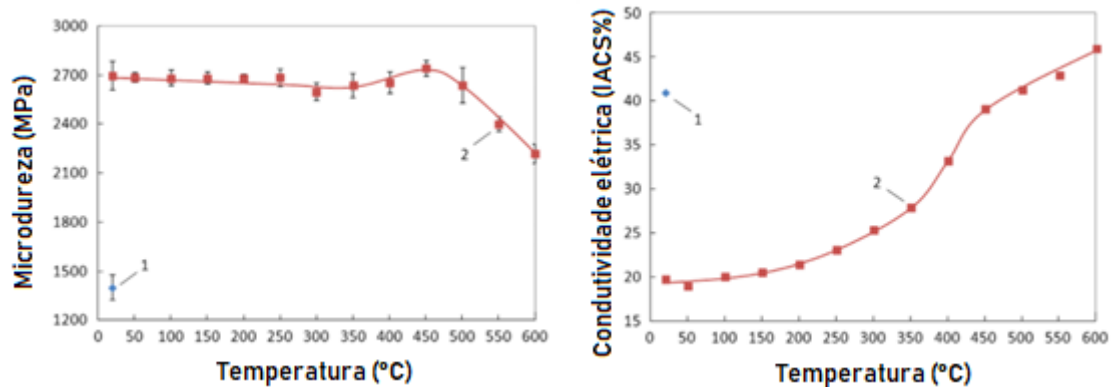


Figura 8. Gráficos de variação da microdureza e condutividade elétrica por temperatura do tratamento térmico na liga de 27% Cr (adaptação de DOBATKIN *et al.*, 2014).

Como realizado anteriormente, foram feitos gráficos de microdureza (MPa) por condutividade (IACS%) para as ligas, como mostrado nas Figuras 9, 10 e 11.

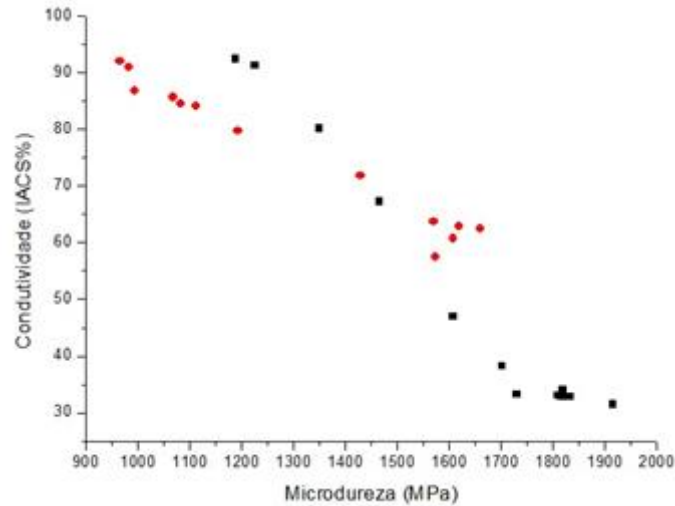


Figura 9. Variação da microdureza por condutividade elétrica nas ligas de 0,75% Cr (pontos pretos – temperadas / pontos vermelhos – recozidas).

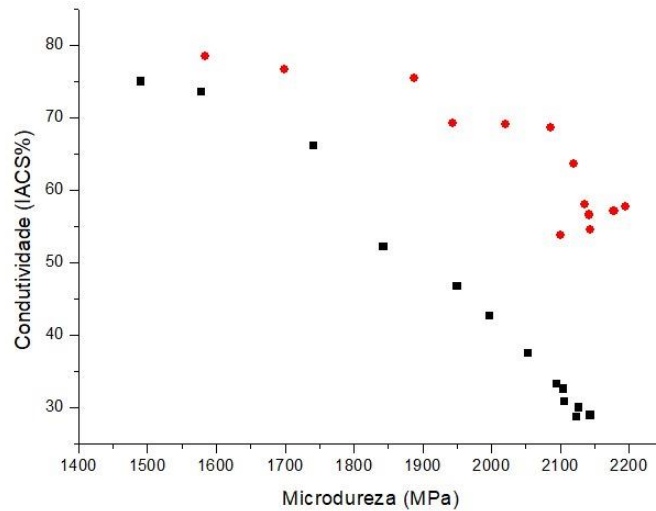


Figura 10. Variação da microdureza por condutividade elétrica nas ligas de 9,85% Cr (pontos pretos – temperadas / pontos vermelhos – recozidas).

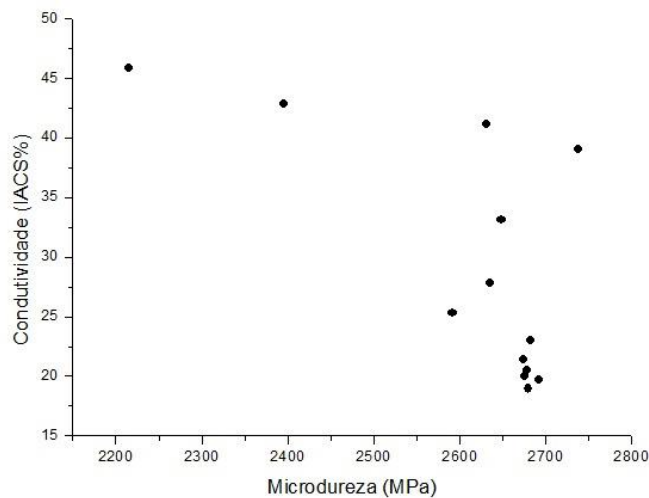


Figura 11. Variação da microdureza por condutividade elétrica na liga de 27% Cr.

Analisando-se os gráficos, percebe-se que, dentre os conjuntos de dados obtidos, o único que demonstrou o mesmo formato de curva da função de ajuste escolhida foi o da liga temperada com concentração de 0,75% Cr. Portanto, aplicou-se a modelagem matemática proposta apenas a esta liga, considerando que a presença de precipitados afetaria a relação em questão, e obtendo-se o ajuste representado na Figura 8.

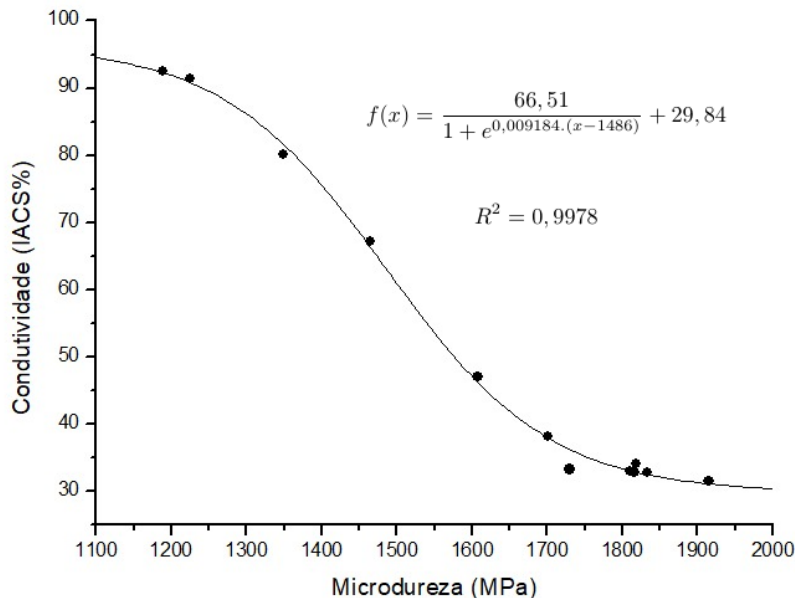


Figura 8. Gráfico da curva ajustada e parâmetros de ajuste.

Guyot [5] e Tenwick [6] mostram relações lineares entre a porcentagem de Cr em solução sólida em ligas Cu-Cr com a dureza e resistividade elétrica da liga. Como a condutividade é o inverso da resistividade, obtém-se a Equação 4, na qual C expressa a condutividade elétrica, ρ_i expressa a resistividade do composto 'i' puro e X_{Cr} a concentração de Cr na liga. Na Equação 5, 'a' e 'b' são constantes e H expressa a dureza.

$$C = \frac{1}{\rho_{Cu} + \rho_{Cr} X_{Cr}} \quad (4)$$

$$H = aX_{Cr} + b \quad (5)$$

A partir destas equações, encontra-se uma relação direta entre condutividade elétrica e dureza ao variar-se a concentração de Cr em solução sólida na liga (Equação 6):

$$C = \frac{a}{\rho_{Cr} H + a\rho_{Cu} - b\rho_{Cr}} \quad (6)$$

Como dito anteriormente, esta concentração de Cr em solução sólida pode variar de 0% até por volta de 0,75% em ligas Cu-Cr. Como trata-se de uma faixa de valores muito estreita e próxima da assíntota vertical da curva, é possível aproximar a relação apresentada na equação 6 para uma relação linear. Com isso, podemos considerar uma variação linear dos parâmetros 'a', 'b', 'c' e 'd' da modelagem proposta em função da concentração de Cr, mostrada na Figura 9.

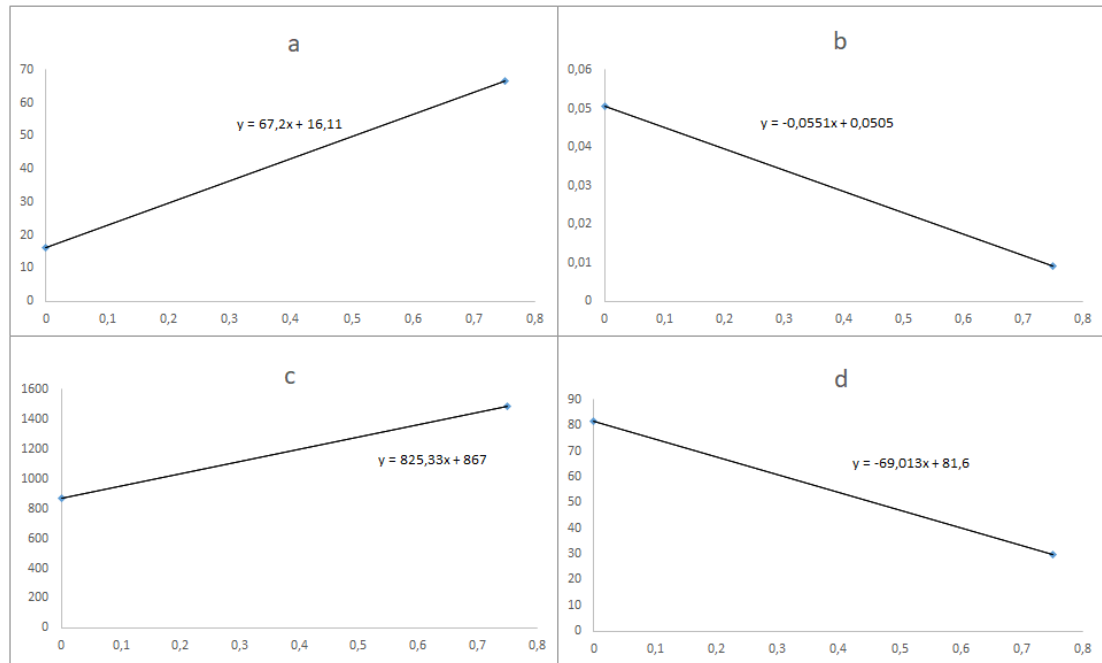


Figura 9. Regressão linear dos parâmetros da curva em função da concentração de Cr.

Isso permite equacionar o valor da condutividade elétrica (C) como função da dureza (H) e da concentração de Cr (x), como mostrado a seguir (Equação 7):

$$C(H, x) = \frac{67,2x + 16,11}{1 + e^{[-0,0551x + 0,0505 \cdot (H - 825,33x - 867)]}} - 69,013x + 81,6 \quad (7)$$

Rearranjando-se a equação, obtemos (Equação 8):

$$H(C, x) = \frac{\ln\left(\frac{-1,813x + 97,71 - C}{C + 69,013x - 81,6}\right)}{-0,0551x + 0,0505} + 825,33x + 867 \quad (8)$$

Supondo que em uma dada aplicação seja necessária uma condutividade elétrica mínima de 90% IACS, utilizou-se o modelamento obtido para determinar o maior valor de dureza possível dada esta condição. Como são grandezas inversamente proporcionais, o valor de dureza máximo ocorrerá com uma condutividade igual a 90% IACS, restando apenas a determinação da concentração de Cr que maximiza a dureza.

Derivando-se a equação 8 em função de 'x', a igualando a 0 e resolvendo-se a equação em 'x', obtém-se o valor de concentração de Cr desejado. Foi necessária a utilização de métodos numéricos para a resolução de tal equação, tendo sido encontrada uma concentração ótima de Cr em solução sólida na liga de 0,682%.

3 CONCLUSÃO

A relação matemática proposta mostrou-se eficaz na modelagem do comportamento da condutividade em relação a dureza de ligas Cu-Cr em solução sólida e permitiu o cálculo da concentração ideal de Cr que maximiza a dureza da liga, dada uma condutividade mínima aceitável. Cálculos com o modelo permitiram a obtenção de resultados consistentes em uma faixa de 0% a 1,2% de concentração de Cr, o que sugere que a modelagem é válida também para soluções sólidas supersaturadas ou

com baixa presença de precipitado, que não seja suficiente para interferir na relação. Esta modelagem poderia ser aplicada a outras ligas, desde que haja dados suficientes para a aplicação dos métodos de ajuste de curva.

REFERÊNCIAS

- 1 Corrêa VR, Sousa TG, Brandão LP. Produção e microcaracterização de microcompósitos de Cu/NbTi. In: Associação Brasileira de Metalurgia, Materiais e Mineração. Anais do 72º Congresso Anual da ABM; São Paulo, 2017. São Paulo: ABM; 2017; 72: 2634 – 2641.
- 2 Habibi A, Ketabchi M, Eskandarzadeh M. Nano-grained pure copper with high-strength and high-conductivity produced by equal channel angular rolling process. Journal of Materials Processing Technology. 2011; 211: 1085 – 1090
- 3 Dobatkin SV, Gubicza J, Shangina DV, Bochvar NR, Tabachkova NY. High strength and good electrical conductivity in Cu-Cr alloys processed by severe plastic deformation. Materials Letters. 2015; 153: 5 – 9
- 4 Nes E, Marthinsen K, Brechet Y. On the mechanism of dynamic recovery. Scripta Materialia. 2002; 47, issue 9: 607-611
- 5 Guyot P, Cottignies L. Precipitation kinetics, mechanical strength and electrical conductivity of AlZnMgCu alloys. Acta Materialia. 1996; vol. 44, num. 10: 4161 - 4167
- 6 Tenwick MJ, Davies HA. Enhanced strength in high conductivity copper alloys. Materials Science and Engineering. 1988; 98: 543 - 546