

TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS COM NUCLEAÇÃO EM SÍTIOS PREFERENCIAIS*

André Luiz Moraes Alves¹
Felipe da Silva Siqueira²
Guilherme Dias da Fonseca¹
Gláucio Soares da Fonseca³
Wesley Luiz da Silva Assis³
Paulo Rangel Rios³

Resumo

Com o contínuo advento dos materiais aumenta-se as chances de uma dada transformação envolver duas ou mais fases produto. Quando essa transformação de uma fase matriz em duas ou mais fases produto ocorre, ela pode ser simultânea, quando as fases produto iniciam-se no mesmo instante, ou sequencial, quando elas iniciam-se em tempos diferentes. É sabido, pela teoria clássica da nucleação, que a nucleação heterogênea tem vantagens sobre a nucleação homogênea, e que vários sítios podem se tornar preferenciais por favorecerem a nucleação heterogênea. Dois sítios preferenciais bastante presentes são a interface de precipitados e os contornos de grão. Neste contexto, um modelamento analítico e computacional, via cone causal, foi empregado para investigar transformações simultâneas e sequenciais que possuem sítios preferenciais para a nucleação. Considerou-se que uma fase matriz policristalina que possui precipitados esféricos transforma-se em duas fases produto, 1 e 2, onde a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão. Os resultados de simulação tiveram ótima concordância com o modelamento analítico e observou-se que cada sítio preferencial teve um efeito muito distinto nas microestruturas simuladas.

Palavras-chave: Transformações de fase; Recristalização; PSN; Simulação computacional.

SIMULTANEOUS AND SEQUENTIAL TRANSFORMATIONS WITH NUCLEATION AT PREFERRED SITES

Abstract

The continuous advent of materials may increase the occurrence of transformations involving two or more product phases. When this transformation of a matrix phase into two or more product phases takes place, it can be simultaneous, when the product phases start at the same time, or sequential, when the product phases start at different times. It is already known that from the classical nucleation theory the heterogeneous nucleation has advantages over homogeneous nucleation. Several sites may become preferred because they favor heterogeneous nucleation. Two fairly preferred sites are the interface of precipitates and the grain boundaries. In this context, an analytical and computational model, via causal cone, were used to investigate simultaneous and sequential transformations that have preferential sites for nucleation. One considered that a polycrystalline matrix phase having spherical precipitates transforms into two product phases, 1 and 2. The product phase 1 nucleated at the matrix/particles interface and the product phase 2 nucleated at the grain boundaries. The simulation results had an excellent agreement with the analytical modeling. It was observed that each preferred site had a very different effect on the simulated microstructures.

Keywords: Phase transformations; Recrystallization; PSN; Computer simulation.

¹ Engenharia Metalúrgica, Doutorando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Volta Redonda, RJ, Brasil.

² Engenharia Metalúrgica, Graduando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Engenharia Metalúrgica, Doutor, professor, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Volta Redonda, RJ, Brasil.

1 INTRODUÇÃO

A maioria dos estudos das transformações de fase leva em conta a transformação de uma fase matriz em uma única fase produto. Ou ainda a recristalização de uma matriz deformada em um produto livre de deformação. Entretanto, com o contínuo advento dos materiais aumenta-se as chances de uma dada transformação envolver duas ou mais fases produto. Quando essa transformação da matriz em duas ou mais fases produto ocorre, ela pode ser simultânea, quando as fases produto iniciam-se no mesmo instante, ou sequencial, quando elas iniciam-se em tempos diferentes. O modelamento analítico das transformações simultâneas e sequenciais se dá pelo modelo de Rios e Villa[1]. Alves et. al.[2] também estudaram vários casos de transformações simultâneas e sequenciais via simulação computacional.

As transformações de fase são comumente reportadas como transformações por nucleação e crescimento, portanto, uma das etapas mais importantes é a etapa da nucleação. É sabido, pela teoria clássica da nucleação, que a nucleação heterogênea tem vantagens sobre a nucleação homogênea, e que vários sítios podem se tornar preferenciais por favorecerem a nucleação heterogênea. Dois sítios preferenciais bastante presentes são a interface de precipitados e os contornos de grão. Goetz[3], por exemplo, observou a nucleação nesses dois sítios preferenciais na recristalização dinâmica. Quando se trata da recristalização esses sítios ganham ainda mais relevância, uma vez que diferentes regiões recristalizadas com diferentes componentes de textura podem surgir e a textura pode ser influenciada pelo sítio que as originou.

A nucleação em precipitados também já foi observada em diversos estudos, por exemplo, em partículas que se formam dentro do metal de solda[4–6], ou ainda, na recristalização, com a ocorrência do PSN[7–10]. Recentemente, Alves, Villa e Rios[11], desenvolveram um modelo analítico para transformações por nucleação e crescimento nas quais a nucleação ocorre na interface de partículas esféricas. Seu modelo analítico é válido para PSN durante a recristalização, bem como para transformações de fase que tenham a nucleação na interface de precipitados previamente existentes.

Neste contexto, e devido à sua relevância, buscou-se nesse trabalho o modelamento analítico e computacional das transformações simultâneas e sequenciais que possuem sítios preferenciais para a nucleação das fases produto. Para tal, considerou-se a transformação de uma fase matriz policristalina que possui partículas esféricas em duas fases produto, 1 e 2, ocorrendo de maneira simultânea e/ou sequencial em que a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partícula e a fase produto 2 nos contornos de grão.

Discutiu-se em detalhes o efeito dessa nucleação em sítios preferenciais, nas microestruturas simuladas e conseqüentemente nas propriedades dos materiais que sofrem essas transformações.

2 MODELO ANALÍTICO PARA TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS COM NUCLEAÇÃO DA FASE PRODUTO 1 NA INTERFACE DE PARTÍCULAS ESFÉRICAS E DA FASE PRODUTO 2 NOS CONTORNOS DE GRÃO

Através do princípio da superposição abordado por Rios e Villa[1], quando as transformações são consideradas independentes, pode-se usar modelos que inicialmente foram desenvolvidos para a transformação envolvendo a formação de uma única fase produto, para se obter o modelo para as situações em que duas ou

mais fases produto se formam simultaneamente ou sequencialmente. Com esse princípio obtém-se tanto parâmetros globais assim como parâmetros individuais de cada fase produto ao longo da transformação.

Nos casos abordados neste trabalho a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas, portanto ela é regida pelas Equações (1) e (2). As Equações (1) e (2) foram retiradas do trabalho de Alves, Villa e Rios[11] apenas para a conveniência dos leitores, para mais detalhes sobre o modelo analítico para a nucleação em partículas esféricas e o desenvolvimento detalhado das Equações (1) e (2), vide [11].

$$\begin{aligned}
 &\text{Para } 0 \leq t \leq 2R/G \\
 V_V(t) = &1 - \exp\left(-\lambda \left[4\pi \int_R^{Gt+R} \left\{ 1 \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \left. - \exp\left(-\frac{c}{4\pi R^2} 2\pi R \left(R - \frac{\rho^2 + R^2 - G^2 t^2}{2\rho} \right) \right) \right\} \rho^2 d\rho \right] \right) \quad (1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\text{Para } t > 2R/G \\
 V_V(t) = &1 - \exp\left(-\lambda \left[(1 - e^{-c}) \frac{4}{3} \pi ((Gt - R)^3 - R^3) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 4\pi \int_{Gt-R}^{Gt+R} \left\{ 1 \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \left. - \exp\left(-\frac{c}{4\pi R^2} 2\pi R \left(R - \frac{\rho^2 + R^2 - G^2 t^2}{2\rho} \right) \right) \right\} \rho^2 d\rho \right] \right) \quad (2)
 \end{aligned}$$

Onde R é o raio da partícula, c é a média de núcleos por unidade de área da partícula e λ é o número de partículas por unidade de volume. Derivando-se as Equações (1) e (2), estima-se a área superficial entre material transformado e não transformado por unidade de volume, S_V .

Por outro lado, a fase produto 2 nucleou nos contornos de grão e apesar de serem sítios preferenciais, essa transformação é bem modelada por JMAK[12–14], a Equação (3), assim como foi mostrado por Fonseca et. al.[15].

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_V G^3 t^3\right) \quad (3)$$

Para a transformação simultânea, isto é, as fases 1 e 2 iniciando-se juntas no tempo $t = 0$, pelo princípio da superposição de Rios e Villa[1] pode-se obter a fração volumétrica esperada pela combinação dos modelos individuais das duas fases, $V_V^A(t)$:

$$V_V^A(t) = 1 - \left((1 - V_{V_1}^A(t)) \times (1 - V_{V_2}^A(t)) \right) \quad (4)$$

Onde os termos com o sobrescrito “A” são os modelos individuais considerando-se como se apenas essa única transformação estivesse ocorrendo. Essa consideração significa que $V_{V_1}^A(t)$ é a Equação (1) ou (2), e $V_{V_2}^A(t)$ é a Equação (3). De posse de $V_V^A(t)$ pode-se obter a fração volumétrica da fase produto 1 na transformação simultânea por:

$$V_{V1}(t) = \int_0^t \frac{1 - V_V^A(s)}{1 - V_{V1}^A(s)} \frac{\partial V_{V1}^A(s)}{\partial s} ds \quad (5)$$

Uma expressão análoga pode ser obtida para a fração volumétrica da fase 2, $V_{V2}(t)$, apenas substituindo-se 1 por 2 na Equação (5).

De forma semelhante, obtém-se a nova quantidade de área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para a fase 1, S_{V1} , através da equação:

$$S_{V1}(t) = \frac{1 - V_V^A(t)}{1 - V_{V1}^A(t)} S_{V1}^A(t) \quad (6)$$

Novamente, a mesma expressão para a fase 2, pode ser obtida pela substituição de 1 por 2 na Equação (6).

Para a transformação sequencial, a fase 1 inicia-se no tempo $t = 0$, e a fase 2 inicia-se em um tempo posterior t_2 , como consequência, quando o tempo $t < t_2$, há apenas a fase 1 e $V_{V1}(t)$ é a Equação (1) ou (2), e $V_{V2}(t) = 0$. Da mesma maneira, $S_{V1}(t) = S_{V1}^A(t)$ e $S_{V2}(t) = 0$. Quando a transformação passa o tempo t_2 , isto é $t \geq t_2$ as duas fases estão presentes, assim de forma semelhante a Equação (5), obtém-se a fração volumétrica da fase produto 1 na transformação sequencial por:

$$V_{V1}(t) = \int_{t_2}^t \frac{\partial \ln(1 - V_{V1}^A(s))}{\partial s} ds \quad (7)$$

Novamente, obtém-se uma expressão análoga para $V_{V2}(t)$ apenas se substituindo 1 por 2 na Equação (7). Vale mais uma vez se destacar que a Equação (7) é válida apenas para quando $t \geq t_2$. Quando $t \geq t_2$ a área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para cada fase produto também pode ser estimada pela Equação (6).

Com as novas expressões para $V_{V1}(t)$ e $V_{V2}(t)$, pode-se calcular a fração volumétrica total, V_V , por:

$$V_V(t) = V_{V1}(t) + V_{V2}(t) \quad (8)$$

Cabe enfatizar que as Equações (4-8) foram propostas no trabalho de Rios e Villa[1], e elucidadas aqui apenas por conveniência. Elas compõem o princípio da superposição. Para mais detalhes recomenda-se a leitura de Rios e Villa[1].

3 METODOLOGIA

Adotou-se nas simulações a metodologia do cone causal[16] com uma matriz de 300 x 300 x 300 células cúbicas, considerou-se cada célula cúbica como aproximadamente 0,33 μm , assim a matriz possui 100 μm x 100 μm x 100 μm . Também se empregou condições de contorno periódicas em todas as faces da matriz, de modo que um grão que atinja uma face, continua seu crescimento na face oposta.

Como base para a transformação adotou-se uma fase matriz policristalina que contém partículas esféricas, essa matriz pode ser vista na Figura 1. As partículas esféricas tiveram um diâmetro médio de 5 μm e 153 partículas ocuparam um volume

de 1% dessa matriz. Na geração dessa matriz policristalina, 3376 núcleos surgiram na interface matriz/partículas, o tamanho médio de grão ao final da matriz foi de aproximadamente 10 μm . Essa matriz policristalina foi desenvolvida com a metodologia descrita em Alves, Villa e Rios[11], portanto, nota-se bastante semelhança entre a Figura 1, com as microestruturas simuladas mostradas no trabalho de Alves, Villa e Rios[11].

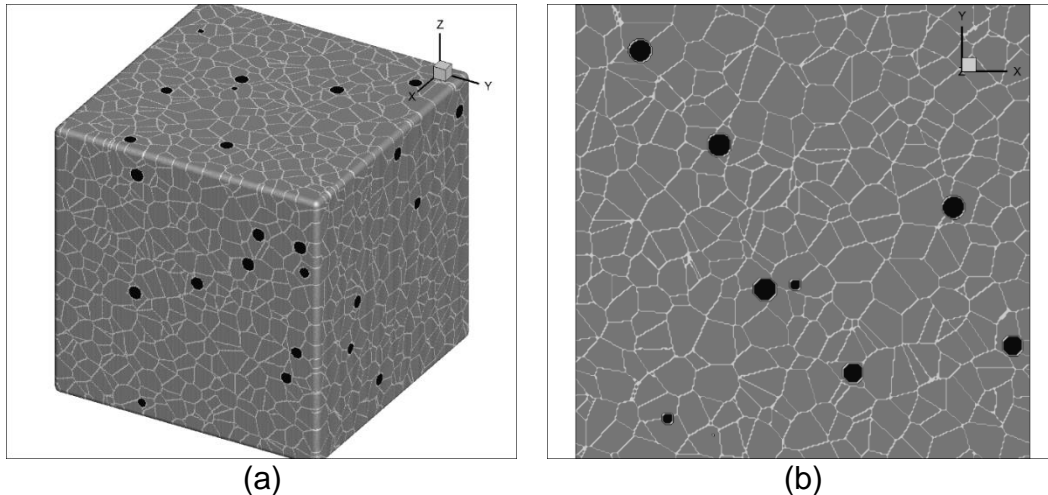


Figura 1. Representação da microestrutura simulada da fase matriz policristalina com precipitados esféricos, antes da transformação nas fases produto. (a) Microestrutura simulada em 3D, (b) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Considerou-se a transformação dessa matriz policristalina em duas fases produto distintas, denominadas, fase 1 e fase 2. As fases produto possuem número de núcleos iniciais, N_1 e N_2 , e velocidades de crescimento, G_1 e G_2 ambos independentes e iguais. Entretanto, a fase 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase 2 nos contornos de grão da matriz policristalina. Para ambas as fases, a nucleação foi por saturação de sítios e a velocidade de avanço das interfaces foi mantida constante. Definiu-se o número de núcleos de cada fase produto por processo de ponto de Poisson homogêneo[16], ou seja, embora existam sítios preferenciais para cada fase, ambas tiveram os núcleos uniformemente distribuídos exclusivamente nesses sítios preferenciais.

A transformação da fase matriz policristalina nas fases produto 1 e 2 se deu de maneira simultânea ou sequencial. O tempo de incubação considerado para a nucleação da segunda fase da transformação sequencial foi quando a fase produto 1 apresentou fração volumétrica transformada, $V_{V1} = 0,1$.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A seguir demonstra-se os casos em que a fase matriz policristalina que contém precipitados esféricos se transforma em duas fases produto de forma simultânea ou sequencial onde a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nucleou nos contornos de grão. Para todos os casos comparou-se os resultados de simulação com as Equações (5-8), portanto, para a comparação entre simulação e modelo analítico, mostrou-se as curvas de cinética, V_V versus Tempo, e a curva de S_V versus V_V , o chamado caminho microestrutural[18]. Nessas comparações os dados da simulação foram representados por pontos e os dados provenientes das equações analíticas por

linhas. Ressalta-se que em todos os casos o coeficiente de determinação, R^2 , foi invariavelmente maior que 0,99.

Também se mostrou as microestruturas simuladas, onde a fase produto 1 é a mais clara e a fase produto 2 a mais escura, em preto foram representadas as partículas esféricas. Vale se destacar que o volume disponível para a transformação é o volume livre da matriz policristalina, ou seja, as regiões fora das partículas, nenhuma das fases cresce para dentro das partículas. Ao se atingir $V_V = 1$ significa que se ocupou toda a matriz com exceção das partículas.

4.1 Transformações Simultâneas

Considerou-se nesse caso uma transformação simultânea com número de núcleos $N_1 = N_2 = 1688$, que representa um número total de núcleos, isto é, $N_1 + N_2$ igual ao presente na matriz policristalina, mostrada na Figura 1. Assim, nesse caso também se obteve um tamanho de grão médio de 10 μm . As velocidades de crescimento de cada fase produto foram, $G_1 = G_2$. Na Figura 2, observa-se uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico, Equações (5-8). Na Figura 3 mostra-se a evolução microestrutural simulada desse caso.

Na Figura 2-a, observa-se um comportamento interessante, embora as duas fases produto tenham surgido juntas e possuem os mesmos parâmetros, isto é, $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ elas contribuem de maneira distinta para a transformação. Quando se tem uma transformação simultânea em que as fases produto possuem os mesmos parâmetros, isto é, $N_1 = N_2$ e $G_1 = G_2$ e os núcleos distribuídos uniformemente, espera-se que ambas as fases contribuam igualmente para a transformação, logo, ao final da transformação espera-se $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$. Como foi observado por Rios e Villa[1] e por Alves et. al.[2].

A contribuição distinta de cada fase produto se deve ao fato de que cada uma nucleou em um sítio diferente, a fase 1 que nucleou na interface matriz/partículas teve seu crescimento influenciado pelas partículas. Como foi dito, nenhuma das fases é capaz de crescer para dentro das partículas, então é intuitivo pensar que a fase 1 que surgiu na superfície da partícula, tenha seu crescimento mais afetado. Os grãos da fase 1, no início da transformação, não conseguem manter seu formato esférico devido ao choque, do inglês "*impingement*", com as partículas. Além disso, um alto número de núcleos acentua o efeito do "*impingement*" entre os próprios grãos da fase 1. De fato, aumentando-se o número de núcleos, como o número de partículas é fixo, aumenta-se o número médio de núcleos por partícula, c . Nessa simulação foram 153 partículas com 1688 núcleos para a fase 1, isso significa um $c > 10$. Quanto maior o c , maior a probabilidade de que os núcleos que surgiram nas partículas se choquem, e conseqüentemente, além desses núcleos sofrerem o "*impingement*" imediato com a partícula no qual nucleou, ele sofre de maneira precoce com o "*impingement*" com os grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. Em casos extremos, quando há saturação das partículas, o crescimento dos núcleos que nuclearam nas partículas só se dá na direção normal às partículas. Esse "*impingement*" precoce é evidenciado na Figura 3-a, onde observa-se que os grãos da fase 1, rapidamente envolvem as partículas e crescem "espremidos" uns contra os outros.

Por outro lado, a área de contornos de grão, onde a fase 2 nucleou, é evidentemente muito maior que a área de partículas, portanto a fase 2 tem menor probabilidade de encontrar um grão vizinho do que a fase 1, assim sofre menos com o "*impingement*" entre os grãos vizinhos. Esse fato pode ser evidenciado quando se

compara o tamanho de grão da fase 1 com o da fase 2 na Figura 3-c, nota-se claramente um tamanho de grão maior para a fase 2. Além disso, os contornos de grão da matriz policristalina prévia não agem como barreira para o crescimento da fase 2, logo, os grãos da fase 2 mantêm seu formato esférico no início da transformação.

Nesse contexto, como a fase 1 sofre com o “*impingement*” das partículas e com o “*impingement*” entre os grãos que nuclearam na mesma partícula, ela tem o crescimento ainda mais afetado e em contrapartida ocorre um maior predomínio da fase 2, como nota-se claramente na Figura 2-a.

A Figura 2-b também mostra o mesmo efeito para o S_V , nota-se claramente que $S_{V1} < S_{V2}$, uma vez que parte da área superficial da fase 1, não está em contato com a matriz, mas sim com as partículas. Destaca-se que a fase 2 também pode encontrar as partículas, porém, a fase 1 que nucleou nas partículas tem esse efeito muito mais expressivo.

Na Figura 3-a, evidencia-se que a maioria dos grãos da fase 1, regiões mais claras, encontram-se próximos às partículas, já os grãos da fase 2, regiões mais escuras, encontram-se próximos aos contornos de grão da matriz policristalina prévia. A tecelagem na Figura 3-a, e nas demais que se seguem, representa a região dos contornos de grão da matriz policristalina prévia. Também pela Figura 3-a, observa-se que para $V_V = 0,1$ torna-se difícil diferenciar os tamanhos de grão de cada fase, isso é um indicador que ambas as fases nuclearam no mesmo instante.

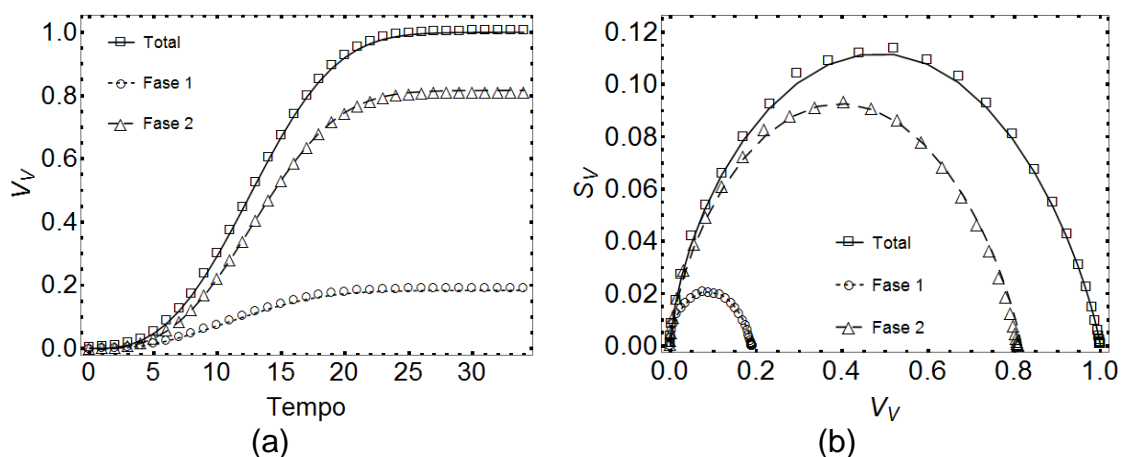


Figura 2. Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) V_V versus tempo, (b) caminho microestrutural.

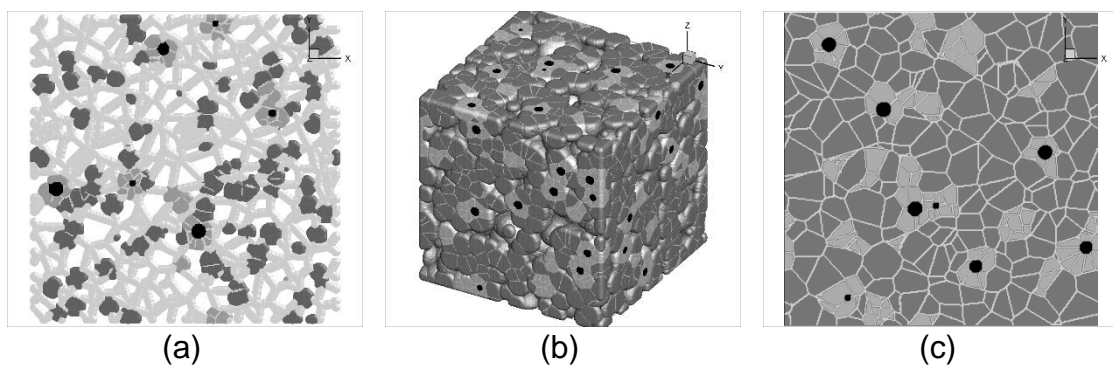


Figura 3. Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$, (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

4.2 Transformações Sequenciais

Considerou-se para esse caso uma transformação sequencial com os mesmos parâmetros do caso anterior, número de núcleos $N_1 = N_2 = 1688$, e $G_1 = G_2$, a única diferença é que nesse caso a nucleação da fase 2 ocorreu quando $V_{V1} = 0,1$. Na Figura 4, novamente observa-se uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico, Equações (5-8), também para a transformação sequencial.

Novamente nessa transformação sequencial observa-se um comportamento bastante distinto daquele observado por Rios e Villa[1] e por Alves et. al.[2]. Alves et. al.[2] mostraram que quando ocorre uma transformação sequencial onde os núcleos são distribuídos de maneira uniformemente aleatória, e as fases produto possuem os mesmos parâmetros, isto é, $N_1 = N_2$ e $G_1 = G_2$, uma pequena vantagem para a fase 1, ou seja, a nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$, já causa um predomínio da fase 1. De fato, seus resultados mostraram que nessas condições, ao fim da transformação, a fase 1 ocupou cerca de 80% do volume da matriz. No caso da Figura 4 a diferença crítica é que a fase 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase 2 nos contornos de grão. Como já discutido na seção anterior, a fase 1 que nucleou na interface matriz/partículas tem seu crescimento mais afetado devido ao “impingement” com as partículas e com os seus grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. O fato de a fase 1 ter seu crescimento afetado por esse “impingement” permite que a fase 2 alcance a fase 1, mitigando o efeito do tempo de incubação para a fase 2 dessa transformação sequencial. Nessa transformação aqui simulada, como se pode evidenciar na Figura 4-a, o número de núcleos adotado permitiu que a fase 2 ultrapassasse a fase 1.

A Figura 5 mostra a evolução microestrutural simulada desse caso. Nota-se uma microestrutura interessante onde aparecem ilhas de grãos da fase 1 em torno das partículas, e essas ilhas foram envolvidas pelos grãos da fase 2. Na Figura 5-a se observa os grãos da fase 1 em torno das partículas, esses nuclearam primeiro, e a nucleação da fase 2 nos contornos de grão da matriz policristalina prévia, com isso evidencia-se a nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$.

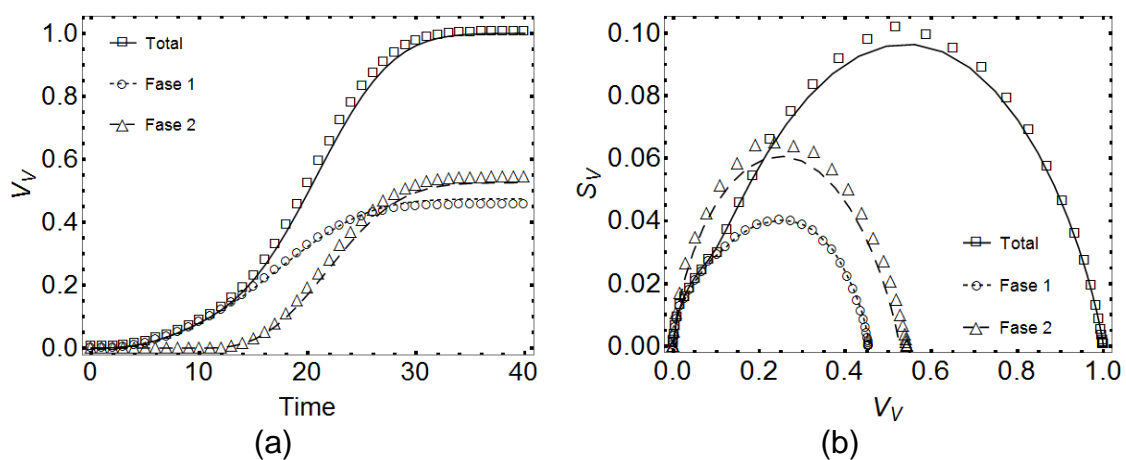


Figura 4. Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$: (a) V_V versus tempo, (b) caminho microestrutural.

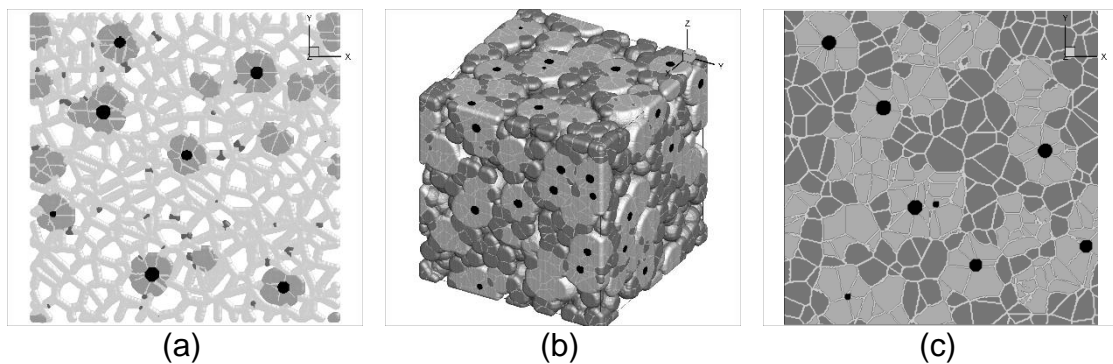


Figura 5. Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$: (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$, (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Cabe destacar que o formato e principalmente o tamanho de grão da matriz policristalina prévia, podem afetar as transformações nas quais a nucleação ocorre nos contornos de grão. Esse efeito está fora do escopo deste trabalho, entretanto já foi estudado previamente [15].

Analisando-se os resultados exibidos acima nota-se claramente que cada sítio preferencial teve um efeito muito distinto nas transformações. O fato de a fase produto 1 ter nucleado exclusivamente na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão fez com que as duas fases apresentassem um comportamento muito distinto. Desse modo pôde-se analisar bem as transformações simultâneas e sequenciais apenas analisando-se as curvas aqui demonstradas. Entretanto, trata-se de transformações com certo grau de complexidade, deste modo é difícil se afirmar que a boa análise dessas transformações, analisando-se somente esses parâmetros, será possível para todos os casos que podem ocorrer. Por exemplo, quando se envolve a variação do tamanho de grão da matriz policristalina prévia, aumenta-se a complexidade do problema, e nesse caso recomenda-se a análise da contiguidade e dispersão [15]. Portanto, para casos mais complexos aconselha-se o uso de parâmetros adicionais, uma vez que a análise destes pode ajudar o pesquisador a melhor compreender as características dessas transformações [2,15].

5 CONCLUSÃO

Um modelamento computacional e analítico foi empregado para investigar transformações simultâneas e sequenciais em que uma fase matriz policristalina que possui precipitados esféricos transforma-se em duas fases produto, 1 e 2. Nesse estudo a nucleação de ambas as fases ocorreu em sítios preferenciais, de modo que a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão. A partir dos resultados obtidos conclui-se que:

- Todas as simulações computacionais mostraram uma ótima concordância com o modelo analítico, Equações (5-8). Destaca-se que nenhum ajuste de curva foi

feito, o que reforça a confiança na metodologia de simulação. Com isso obteve-se exemplos de microestruturas 3D, que podem ser produzidas por essas transformações simultâneas e sequencias particulares.

- O princípio da superposição abordado por Rios e Villa[1] foi bem aplicado a essas transformações particulares, e originou as Equações (5-8). Essas Equações (5-8), que corroboraram com as simulações desse trabalho, foram desenvolvidas a partir dos modelos individuais, Equações (1-3).
- A fase 1 que nucleou na interface matriz/partículas tem seu crescimento mais afetado devido ao “*impingement*” com as partículas e com os seus grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. O fato de a fase 1 ter seu crescimento afetado permite um maior predomínio da fase 2 na transformação simultânea, e na transformação sequencial permite que a fase 2 alcance a fase 1, mitigando o efeito do tempo de incubação.
- Os grãos da fase 2, que surgiram nos contornos de grão, mantém seu formato esférico desde o início, e devido a área de contornos de grão ser evidentemente maior que a área de partículas, faz com que a fase 2 tenha uma menor probabilidade de encontrar um grão vizinho do que a fase 1, assim sofre menos com o “*impingement*”.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Os autores também agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) pelo suporte financeiro.

REFERÊNCIAS

- 1 P.R. Rios, E. Villa, Simultaneous and sequential transformations, *Acta Mater.* 59 (2011) 1632–1643.
- 2 A.L.M. Alves, W.L.S. Assis, P.R. Rios, Computer simulation of sequential transformations, *Acta Mater.* 126 (2017) 451–468.
- 3 R.L. Goetz, Particle stimulated nucleation during dynamic recrystallization using a cellular automata model, *Scr. Mater.* 52 (2005) 851–856.
- 4 F.J. Barbaro, P. Krauklis, K.E. Easterling, Formation of acicular ferrite at oxide particles in steels, *Mater. Sci. Technol.* 5 (1989) 1057–1068.
- 5 I. deS. Bott, P.R. Rios, On the Effectiveness of Inclusions as Nucleation Sites in Weld Deposits, *Scr. Mater.* 38 (1998) 1269–1274.
- 6 S.S. Babu, The mechanism of acicular ferrite in weld deposits, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 8 (2004) 267–278.
- 7 F.J. Humphreys, The nucleation of recrystallization at second phase particles in deformed aluminium, *Acta Metall.* 25 (1977) 1323–1344.
- 8 D.J. Jensen, N. Hansen, F.J. Humphreys, Texture development during recrystallization of aluminium containing large particles, *Acta Metall.* 33 (1985) 2155–2162.
- 9 Y. Zhang, D.J. Jensen, Y. Zhang, F. Lin, Z. Zhang, Q. Liu, Three-dimensional investigation of recrystallization nucleation in a particle-containing Al alloy, *Scr. Mater.* 67 (2012) 320–323.

- 10 R.P. De Siqueira, H.R.Z. Sandim, D. Raabe, Particle stimulated nucleation in coarse-grained ferritic stainless steel, *Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.* 44 (2013) 469–478.
- 11 A.L.M. Alves, E. Villa, P.R. Rios, Transformation kinetics for nucleation on second-phase particles: analytical solution and computer simulation, *Acta Mater.* 131 (2017) 523–533.
- 12 W.A. Johnson, R.F. Mehl, Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth, *Trans. Metall. Soc. A.I.M.E.* 135 (1939) 416–441.
- 13 A.N. Kolmogorov, On the Statistical Theory of Metal Crystallization, *Isvetiia Acad. Nauk. SSSR-Seriia Mat.* 1 (1937) 335–359.
- 14 M. Avrami, Kinetics of Phase Change. I General Theory, *J. Chem. Phys.* 7 (1939) 1103.
- 15 G.D. Da Fonseca, F. Da Silva Siqueira, A.L.M. Alves, W.L. Da Silva Assis, P.R. Rios, Microstructural descriptors to characterize computer simulated microstructures generated by nucleation on a Kelvin polyhedra network, *J. Mater. Res. Technol.* 7 (2018) 337–341.
- 16 J.W. Cahn, The Time Cone Method for Nucleation and Growth Kinetics on a Finite Domain, *Mater. Res. Soc. Symp. - Proc.* 398 (1996) 425–437.
- 17 E. Villa, P.R. Rios, Transformation kinetics for nucleus clusters, *Acta Mater.* 57 (2009) 3714–3724.
- 18 R.A. Vandermeer, R.A. Masumura, B.B. Rath, Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations, *Acta Metall. Mater.* 39 (1991) 383–389.