

CURVATURAS DOS GRÃOS: MEDIDAS, MODELOS E SUA APLICAÇÃO AO CRESCIMENTO DE GRÃO¹

Gláucio Soares da Fonseca²

Paulo Rangel Rios³

Resumo

Juntamente com a fração volumétrica, V_V , e área por unidade de volume, S_V , a integral da curvatura da interface por unidade de volume, M_V , ou a curvatura média da interface, H , são importantes parâmetros da microestrutura. Para o crescimento de grão, a curvatura do contorno de grão é especialmente importante, porque, além do significado geométrico, ela é também a força motriz para a migração do contorno de grão. Apesar da sua importância, a curvatura tem sido raramente medida e utilizada na análise de policristais. Modelos geométricos foram derivados para a curvatura média dos grãos individuais, dos contornos de grão e das arestas do grão em função do comprimento médio das intersecções dos grãos. Esses modelos mostraram uma boa concordância com as medidas de curvatura em uma liga Al-1% massa Mn. Além disso, esse trabalho mostra como a medida da curvatura do contorno de grão pode ser aplicada ao crescimento normal de grão e também no ancoramento do contorno de grão por partículas.

Palavras-chave: Microestrutura; Curvatura; Crescimento de grão; Ancoramento; Lei parabólica.

GRAINS CURVATURES: MEASURES, MODELS AND THEIR APPLICATION TO GRAIN GROWTH

Abstract

Alongside volume fraction, V_V , and area per unit of volume, S_V , the integral interface curvature per unit of volume, M_V , or the average interface curvature, H , are important microstructural descriptors. For grain growth, the grain boundary curvature is of special importance because, in addition to its geometrical significance, it is also the driving force for boundary migration. Notwithstanding its importance, curvature has been seldom measured and utilized in the analysis of polycrystals. Geometrical models were derived for the average curvature of individual grains, of grain boundaries and of grain edges, as a function of the mean intercept length. These models show good agreement with curvature measurements in an Al-1mass%Mn alloy. Furthermore, this work shows how grain boundary curvature measurement can be applied to normal grain growth as well as to the effect of particles on grain boundary pinning.

Key words: Microstructure; Curvature; Grain growth; Pinning; Law parabolic

¹ Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ

² Engenheiro Químico, Mestre em Engenharia Metalúrgica, aluno do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF. glaucio@metal.eeimvr.uff.br

³ Professor Ph. D, coordenador do curso de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. prrios@metal.eeimvr.uff.br.

INTRODUÇÃO

Juntamente com a fração volumétrica, V_V , área por um unidade de volume, S_V , a integral da curvatura da interface por unidade de volume, M_V , ou curvatura média da interface, H , são importantes parâmetros microestruturais.^(1,2)

Em 1967 dois trabalhos apareceram simultaneamente^(1,2) com a idéia da curvatura média da interface. Esses trabalhos reportaram métodos estereológicos pelos quais a curvatura média da interface poderia ser obtida através de medidas realizadas em uma seção plana. Quando se considera a importância da curvatura do contorno de grão em relação ao crescimento de grão é surpreendente que tenha sido medida raramente.⁽³⁻⁵⁾ Haroun e Budworth⁽³⁾ mediram a curvatura, mas usaram um método aproximado. Depois, Patterson e Liu⁽⁴⁾ mediram a curvatura do contorno de grão em alumínio puro e mais recentemente, Rios e Fonseca mediram em uma liga Al-1% massa Mn.⁽⁵⁾ Todos esses trabalhos concentraram a curvatura do contorno de grão no contexto de ancoramento de partícula. Já, DeHoff e Liu⁽⁶⁾ usaram a integral da curvatura para examinar a relação entre o tamanho e a topologia do grão. É importante lembrar o leitor que, quando comparados os resultados presentes com os de outros autores,^(1,2,4,6) deve-se considerar que nesse trabalho a curvatura média local, h , é definida como a soma das duas principais curvaturas,⁽⁷⁾ k_1 e k_2 . Portanto, na seqüência as curvaturas médias são multiplicadas por um fator 2 comparadas aos de outros autores.

Um caminho de olhar a estrutura do grão é considerá-lo como uma coleção de interfaces individuais, os contornos de grão. Esse ponto de vista é particularmente importante para o crescimento de grão, pois a velocidade de migração do contorno de grão é proporcional a sua curvatura, logo a força motriz está sendo medida diretamente. Nesse caso a expressão para curvatura média é

$$H_c = \frac{2\pi T_A}{S_V} \quad (1)$$

O subscrito c é adicionado em H para enfatizar que está se referindo a curvatura média dos contornos de grãos individuais. T_A é o número de pontos de tangência entre uma linha teste e um traço curvado do contorno de grão em uma seção por unidade de área.⁽²⁾ As intersecções dessa linha com os pontos triplos não são contados nesse caso. S_V é a área interfacial por unidade de volume de grãos agregados.

Um outro caminho de olhar para um policristal é vê-lo como uma coleção de grãos individuais. Nas palavras de DeHoff, ver o policristal desintegrado. Nesse caso, a curvatura média é dada por:^(1,2)

$$H_g = \frac{2\pi N_A}{S_V} \quad (2)$$

O subscrito g é adicionado em H para enfatizar que está se referindo a curvatura média de grãos individuais. N_A é o número de grãos por unidade de área e S_V é a área interfacial por unidade de volume dos grãos agregados que é a metade da área interfacial por unidade de volume de um policristal desintegrado. Nesse caso, nós não estamos considerando o sinal da curvatura em cada contorno de grão como é feito no terceiro ponto de vista descrito abaixo.

Fazendo a analogia com um quebra-cabeça, quando uma peça encaixa normalmente em outra, entende-se a curvatura média da aresta, ou seja, se os grãos estão separados do policristal, as faces de um grão individual encaixam-se nas faces do grão que era incidente em cima dele no policristal, logo a curvatura dos contornos de grão é zero e só ocorrerá curvatura nas arestas. Assim a curvatura média das arestas, H_a , será dada por:

$$H_a = \frac{\pi P_A}{S_V} \quad (3)$$

O subscrito a é adicionado em H para enfatizar que está se referindo somente a curvatura que reside nas arestas. P_A é o número de pontos triplos por unidade de área.

Em um recente trabalho, modelos geométricos simples foram deduzidos.⁽⁸⁾ Esses modelos relacionam cada curvatura com o comprimento médio das intersecções dos grãos, λ , como apresentado abaixo:

$$H_c = \frac{2}{3} \lambda^{-1} \quad (4)$$

$$H_g = \frac{8}{3} \lambda^{-1} \quad (5)$$

$$H_a = 2\lambda^{-1} \quad (6)$$

Nesse trabalho, as três curvaturas são medidas em uma liga Al-1% massa Mn de alta pureza e os resultados são comparados com modelos geométricos simples. Além disso, implicações específicas das medidas da curvatura dos contornos de grão para o crescimento de grão são ilustradas para os seguintes casos: ancoramento de partícula e crescimento normal de grão. Em relação ao último caso, será deduzida uma nova lei parabólica.

MATERIAIS E MÉTODOS

Uma liga Al-1% massa Mn de alta pureza com o total de impureza menor que 40 ppm foi usada. As amostras da liga foram inicialmente recozidas a 500°C por 4 dias para assegurar que elas encontrassem o equilíbrio. Na seqüência, dois grupos de amostras foram laminados. Um grupo, o grupo 40%, foi

deformado 40% e um outro grupo, o grupo 80%, foi deformado 80% e ambos foram recristalizados a 500°C por 1h antes do tratamento para o crescimento de grão. Detalhes do processo, técnicas experimentais e descrição microestrutural das amostras podem ser encontrados em Rios e Fonseca⁽⁹⁾ e em Rios e Gottstein.⁽¹⁰⁾ O tratamento térmico para o crescimento de grão foi realizado entre 500 e 620°C em passos de 20°C. Área do contorno de grão por unidade de volume, S_V , e área interfacial dos precipitados por unidade de volume, S_{VP} , foram medidas por técnicas metalográficas padrão.⁽¹¹⁾ A integral da curvatura do contorno de grão foi medida usando o método da tangente de DeHoff.^(11,12) T_A , o número de pontos de tangencia entre uma linha teste e um traço curvado do contorno de grão em uma seção por unidade de área foi medido assim como N_A e P_A .⁽¹¹⁾ Erros experimentais são mostrados como barras de erros nas figuras da próxima seção.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Comparação das Medidas de Curvatura com Modelos Geométricos

Nas Figuras apresentadas na seqüência, as amostras que foram deformadas 40% e 80%, serão referidas como amostras “40%” ou “80%”, respectivamente.

Na Figura 1 os resultados obtidos da curvatura média do contorno de grão pelos autores são apresentados juntamente com os de Patterson e Liu.⁽⁴⁾ Além disso, nas Figuras 1, 2 e 3 são apresentadas, respectivamente, as curvaturas, H_c , H_a e H_g versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos, λ^{-1} .

Ocorre uma boa concordância entre os modelos geométricos e dados experimentais. Um grupo de pontos indicados por uma seta nas Figuras 1 e 2 desviam dos modelos. Na Figura 1 eles estão abaixo da linha do modelo. Na Figura 2, os mesmos pontos estão acima da linha do modelo. Logo, esse grupo de amostras tem uma curvatura menor no contorno de grão, interfaces mais “retas” e uma curvatura maior nas arestas do que teriam se seguissem as Equações 4 e 6. Note que na Figura 3 a curvatura média do grão desses pontos, indicados por uma seta, não tem um desvio significativo da Equação 5.

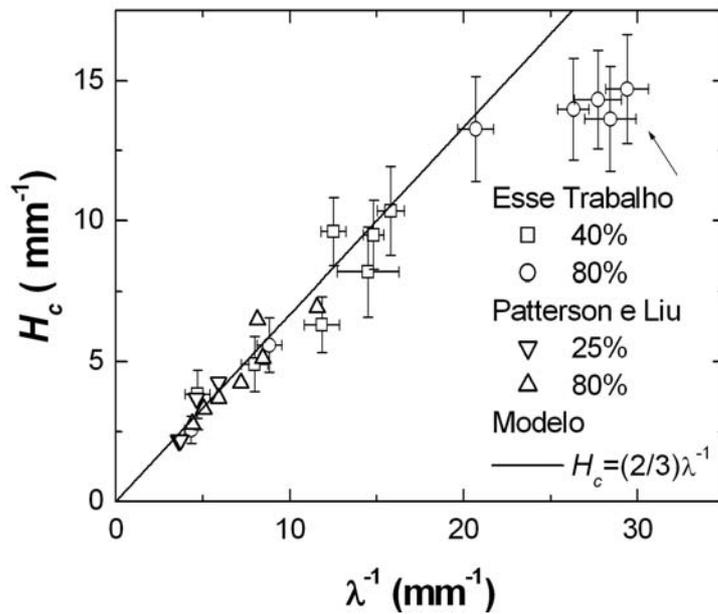


Figura 1. Curvatura do contorno de grão, H_c , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos, λ^{-1} .

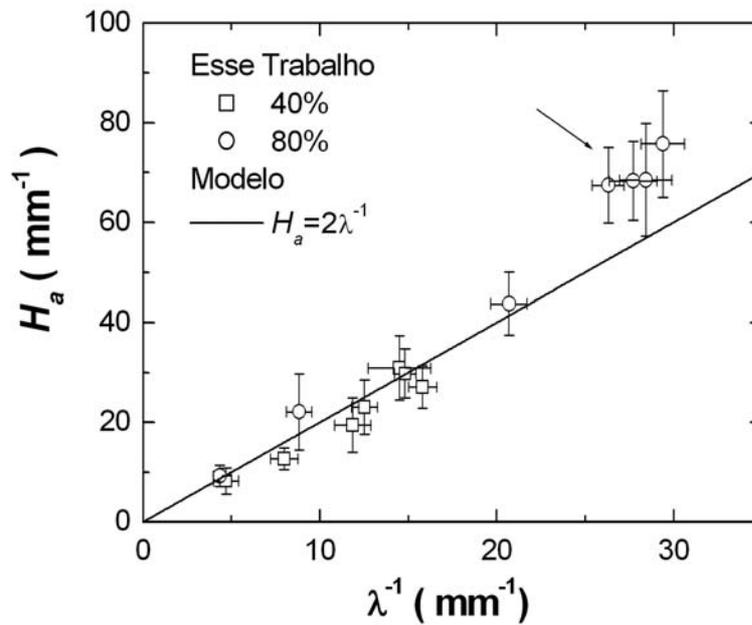


Figura 2. Curvatura da aresta do grão, H_a , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos, λ^{-1} .

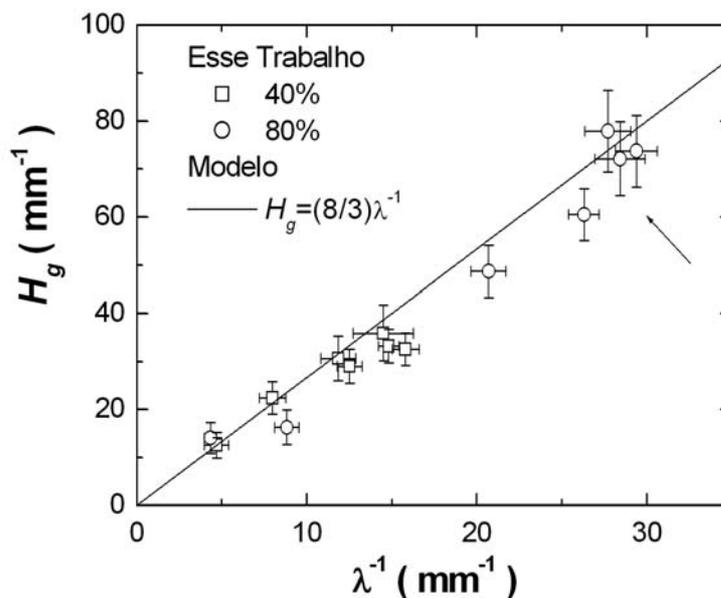


Figura 3. Curvatura do grão, H_g , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos, λ^{-1} .

Curvatura do Contorno de Grão e Crescimento de Grão

Crescimento de grão inibido por dispersão de partículas

Rios e Fonseca⁽⁵⁾ mostraram que uma dispersão de partículas impede o crescimento de grão quando:

$$H_L = S_{VP} \tag{7}$$

em que H_L , é a curvatura limite do contorno de grão.

A comparação entre a Equação 7 e os resultados experimentais é mostrado na Figura 4. O crescimento de grão ocorrerá se a curvatura dos contornos de grão da matriz, H_c , for maior que H_L . Se a curvatura dos contornos de grão da matriz, H_c , for menor que H_L , a matriz é ancorada e o crescimento de grão não ocorre. Inicialmente não ocorre crescimento de grão, pois, os grupos “40%” e “80%”, tem uma curvatura do contorno de grão menor que a curvatura limite. Com o aumento da temperatura de tratamento, as partículas dissolvem e o raio limite do grão aumenta. Em outras palavras, com o aumento da temperatura de tratamento, as partículas dissolvem, a área interfacial das partículas por unidade de volume, S_{VP} , diminui e conseqüentemente a curvatura limite do contorno de grão, H_L , decresce. O crescimento de grão começa quando a curvatura existente do contorno de grão se torna maior ou igual a curvatura limite do contorno de grão. Isso ocorre aproximadamente a partir de 540°C para as amostras 80% e a partir de 580°C para as amostras 40%. Nas temperaturas maiores que essas, a curvatura existente do contorno de grão segue a curvatura limite do contorno de grão como previsto pela Equação 7.

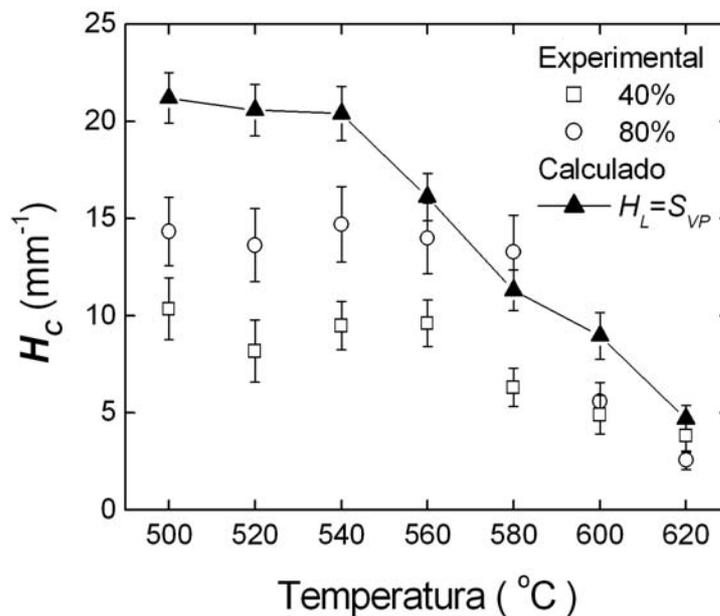


Figura 4. Curvatura do contorno de grão versus temperatura de tratamento.

Curvatura do contorno de grão relacionada com o crescimento normal de grão

A velocidade média de migração dos contornos de grão, G , é proporcional a curvatura do contorno de grão, H_c , por:

$$G = M\gamma H_c \quad (8)$$

em que M é a mobilidade e γ é a energia interfacial dos contornos de grão.

A velocidade média de migração dos contornos de grão, G , pode também ser escrita em função da área do contorno de grão por unidade de volume e do volume varrido pelo movimento do contorno, dV_s/dt :

$$G = \frac{1}{S_V} \frac{dV_s}{dt} \quad (9)$$

Em trabalhos anteriores,^(5,9) os presentes autores, encontraram a seguinte expressão para volume varrido:

$$dV_s = Ndu_m \quad (10)$$

em que N é o número total de grãos e u_m é o volume médio de um grão. Como:

$$N = \frac{V_T}{u_m} \quad (11)$$

em que V_T é o volume total. Dividindo a Equação 10 pelo volume total, têm-se:

$$dV_s = \frac{du_m}{u_m} \quad (12)$$

Considerando os grãos como esferas de mesmo tamanho, têm-se as equações aproximadas:

$$u_m = \frac{4\pi R^3}{3} \quad (13)$$

$$S_V = \frac{1,5}{R} \quad (14)$$

em que R é o raio do grão. Substituindo as Equações 13 e 14 nas Equações 12 e 9, e igualando a velocidade média de migração do contorno de grão obtida, G, com a Equação 8, obtém-se:

$$2 \frac{dR}{dt} = M\gamma H_c \quad (15)$$

Com $\lambda = 4/3 R$ (11) e substituindo a Equação 4 para H_c , tem-se:

$$\frac{3}{2} \frac{d\lambda}{dt} = M\gamma \frac{2}{3\lambda} \quad (16)$$

Rearranjando e integrando a Equação 16, obtém-se uma nova lei parabólica para crescimento de grão em metais puros:

$$\lambda^2 - \lambda_0^2 = \frac{8}{9} M\gamma \Delta t \quad (17)$$

Essa lei é válida quando a Equação 4 é válida. Em outras palavras, a combinação da equação 17 com a Equação 4 consegue separar o efeito da curvatura de outros efeitos. Se a curvatura do contorno de grão, H_c , é medida e segue a Equação 4 então a Equação 17 está correta. Mas isso não significa que outros efeitos não possam causar um desvio da lei parabólica. Por exemplo, a evolução da textura durante o crescimento de grão pode ocorrer e assim o valor médio de $M\gamma$ varia com o tempo. Com um moderno EBSD a análise da evolução da textura durante o crescimento de grão pode ser facilmente verificada.⁽¹⁰⁾

CONCLUSÕES

Medidas de curvatura podem fornecer informações que são muito importantes para redes policristalinas. Modelos geométricos relacionando as curvaturas, dos grãos, do contornos de grão e das arestas com o comprimento médio das intersecções dos grãos mostraram uma boa concordância com os dados experimentais. A curvatura do contorno de grão é especialmente importante para o crescimento de grão. Foi mostrado nesse trabalho, como a curvatura do contorno de grão pode ser diretamente usada no estudo do ancoramento do contorno de grão por partículas e também no estudo do crescimento normal de grão juntamente com a medida trivial do comprimento médio das intersecções dos grãos.

Agradecimentos

Esse trabalho teve o suporte do CNPq, da CAPES e da FAPERJ.

REFERÊNCIAS

- 1 Canh, J.W. The Significance of Average mean curvature and its determination by quantitative metallography. **Trans Metall Soc AIME**, v.239, p.610-616, 1967.
- 2 DeHoff, R.T. The Quantitative estimation of mean surface curvature. **Trans Metall Soc AIME**, v.239, p.617-621, 1967.
- 3 Haroun, N.A.; Budworth, D.W. Modifications to the Zener formula for limitation of grain size. **J. Mater.Sci**, v.3, p. 326-328, 1968
- 4 Patterson, B.R.; Liu, Y. Relationship between grain boundary curvature and grain size **Metall Trans**, v.23A, p.2481-2482, 1992.
- 5 Rios, P.R.; Fonseca, G.S. Grain boundary curvature and particle pinning in an Al-1mass%Mn alloy. **Scripta Mater**, v.50, p.1373-1377, 2004.
- 6 DeHoff, R.T.; Liu, G.Q. On the relation between grain size and grain topology. **Metall Trans A**, v.16A, p.2007-2011, 1985.
- 7 Taylor, J.E. II – Mean curvature and weighted mean curvature. **Acta Metall. Mater**, v.40, p. 1475-1485, 1992.
- 8 Rios, P.R.; Fonseca, G.S. Geometrical models for grain, grain boundary and grain edge average curvature in an Al-1mass% Mn alloy. **Scripta Mater**, v.52, p.893-897, 2005.
- 9 Rios, P.R.; Fonseca, G.S. Grain boundary pinning by Al₆Mn precipitates in an Al-1wt%Mn alloy. **Scripta Mater**, v.50, p.71-75, 2004.
- 10 Rios, P.R.; Gottstein, G. Texture evolution during normal and abnormal grain growth in an Al-1 wt% Mn alloy. **Acta Mater**, v.49, p.2511-2518, 2001.
- 11 Russ, J.C.; DeHoff, R.T. **Practical Stereology**, 2nd Edition, Kluwer Academic, New York EUA, 2000.
- 12 DeHoff, R.T. The Geometrical meaning of the integral mean curvature. **Microstructural Science**, v.5, p.331-348, 1977.