

ESTUDO COMPARATIVO DO MODELO ANALÍTICO COM A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA NUCLEAÇÃO NAS INTERFACES *

Gabriella Maria Silveira de Sá¹

Harison da Silva Ventura²

Mariana Sizenando Lyrio²

Ana Gabriella Conceição dos Santos²

Wesley Luiz da Silva Assis³

Paulo Rangel Rios⁴

Resumo

A nucleação em contornos de grão é uma das mais importantes na maioria dos metais utilizados em engenharia. Um exemplo clássico é a nucleação de ferrita no contorno de grão austenítico, mas este tipo de nucleação também é predominante na recristalização. Nesse trabalho, simulações computacionais são realizadas de modo a estudar a transformação de fase nos contornos de grãos equiaxiais e nos contornos deformados. Os grãos equiaxiais são representados por poliedros de Poisson-Voronoi e os grãos deformados por elipsoides de diferentes razões de aspecto. Os resultados são comparados com os modelos analíticos de JMAK e CAHN. A microestrutura final não é visivelmente afetada pela razão de aspecto dos poliedros predecessores. Todavia a cinética de transformação dos grãos recristalizados é significativamente alterada.

Palavras-chave: Transformações de fase; Recristalização; Cinética de Transformação; Elipsoides.

COMPARATIVE STUDY OF THE ANALYTICAL MODEL WITH COMPUTATIONAL NUCLEATION SIMULATION IN INTERFACES

Abstract

Grain contour nucleation is one of the most important in most metals used in engineering. A classic example is the ferrite nucleation in the austenitic grain contour, but this type of nucleation is also predominant in recrystallization. In this paper, the computational computations are applied in order to study the phase transformation in the equiaxial grains and in the deformed contours. The equiaxial grains are represented by Poisson-Voronoi polyhedrons and grains deformed by ellipsoids of different aspect ratios. The results are compared with the analytical models of JMAK and CAHN. The final microstructure is not visibly affected by the aspect ratio of the polyhedra predecessor. However, it is a transformation kinetics of recrystallized grains. However, the kinetics of transformation of the recrystallized grains is significantly altered.

Keywords: Phase transformations; Recrystallization; Kinetics of transformation; Ellipsoids.

¹ Engenharia Metalúrgica, Doutoranda, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.

² Engenharia Metalúrgica, Mestrando(a), estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Engenharia Metalúrgica, Doutor, professor, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.

⁴ Engenharia Metalúrgica, Doutor, professor, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil..

1 INTRODUÇÃO

Transformações de nucleação e crescimento são predominantes em materiais no estado sólido. Uma das mais importantes maneiras de modelar essas reações é por meio da abordagem proposta por Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov [1-5], também chamada de Teoria de JMAK. Essa teoria assume uma distribuição da nucleação aleatória, crescimento dos núcleos com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz.

Todavia, a maior parte das transformações de interesse dos materiais metálicos ocorre por nucleação heterogênea, como, por exemplo, nos contornos de grãos e nas inclusões. Tais sítios de nucleação são regiões preferenciais para a nucleação em materiais policristalinos por terem um maior nível de energia armazenada. Esses sítios podem ser introduzidos no material, em processos em que haja, uma temperatura ou gradiente de deformação. Sendo possível a sua observação no processo de recristalização, após uma deformação plástica seguida do recozimento.

Um exemplo deste fenômeno, é o processo de recristalização na laminação controlada. O principal objetivo da laminação controlada é refinar a microestrutura e, assim, aumentar tanto a resistência quanto a tenacidade do aço laminado a quente. A diferença entre os aços laminados a quente convencionalmente para os que sofreram laminação controlada está no fato de que a nucleação da ferrita ocorre exclusivamente nas interfaces do grão da austenita para a laminação a quente convencional, enquanto, durante a laminação controlada a nucleação da ferrita ocorre também no interior do grão austenítico, levando a uma estrutura de grão mais refinada [6]. A recristalização pode ser estática ou dinâmica.

O comportamento da recristalização se divide em: recuperação, recristalização parcial e recristalização. Na região parcialmente recristalizada a estrutura consiste da mistura de grãos recristalizados e dos grãos recuperados. Na prática, os passes de laminação são realizados na região de recuperação ou, no máximo, na região parcialmente recristalizada. Mesmo se a deformação for aplicada repetidamente na região de recuperação, ocorre uma recristalização muito lenta e incompleta que leva à formação de uma estrutura mista de grãos ferríticos nucleados nas interfaces dos grãos austeníticos e no interior do grão austeníticos e por este meio obtém-se grãos ultrafinos.

Neste trabalho foi utilizado o método do Cone Causal (CC) para simular reações de nucleação e crescimento nas interfaces, ou seja, nos contornos de grão. Os dados obtidos das simulações foram comparados com o modelo analítico de JMAK e com a teoria analítica de Cahn [7], revisitada por Rios e Villa [8].

2 DESENVOLVIMENTO

2.1 Teoria clássica de JMAK

Em uma série de trabalhos clássicos, Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK) [1-5] desenvolveram uma expressão para a cinética de transformação de fase onde os núcleos estão dispostos aleatoriamente no espaço. A expressão obtida por JMAK para quando os núcleos são formados no tempo ($t = 0$), isto é: “saturação de sítios”, é apresentada na Equação 1:

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

Onde t é o tempo, N_V é número de núcleos por unidade de volume e G é a velocidade de crescimento. Recentemente, Rios e Villa [9] revisitaram o modelo JMAK e o colocaram em bases matemáticas mais rigorosas. Assim, locais “uniformemente aleatórios” podem ser mais precisamente definidos por um processo de ponto de Poisson. O processo de ponto de Poisson homogêneo resulta na mesma expressão obtida por JMAK. Em diversos trabalhos, Rios e Villa [10] obtiveram expressões para situações nas quais a nucleação difere da suposta por JMAK, por exemplo, processo de Poisson não homogêneo, nucleação quando os núcleos estão agrupados (clusters), quando os núcleos ocorrem na superfície e no interior de placas finas, fios finos e pós de pequenas dimensões, dentre outros.

2.2 Nucleação nos contornos de grão

J. W. Cahn [7] derivou expressões para a cinética de transformação quando a nucleação ocorre nos contornos de grão. A expressão obtida por Cahn para o caso de saturação de sítios é:

$$V_V(t) = 1 - \exp(-2 S_V^{\text{planes}} Gt \int_0^1 \{1 - e^{-\pi \lambda_s G^2 t^2 [1 - z^2]}\} dz) \quad (2)$$

Onde S_V^{planos} é a área das interfaces por unidade de volume e λ_s é o número de núcleos por unidade de área de interfaces.

Rios e Villa [9] obtiveram um resultado importante, provaram rigorosamente que a equação de Cahn também é válida para planos paralelos desde que o espaçamento entre os planos siga uma distribuição de Poisson. Este resultado é importante porque planos paralelos podem ser considerados um caso limite de quando o material sofre grande redução de espessura durante a laminação de modo que as interfaces sejam quase que 100% paralelas ao plano de laminação.

2.3 Metodologia

No presente trabalho, foi utilizada a metodologia do Cone Causal [11] para a simulação das reações de nucleação e crescimento. O modelo numérico utilizado na simulação computacional das transformações foi escrito em linguagem Fortran 2003 e compilado pelo Microsoft Visual Studio 2012[®]. Além disso, a paralelização em Open MP, a visualização das microestruturas transformadas com o programa Tecplot 360[™], e os gráficos foram construídos com o auxílio do programa Wolfram Mathematica 12[®]. Em todos os casos utilizou-se nucleação por saturação de sítios. A matriz compreendeu 300x300x300 células cúbicas [12]. Todos os resultados apresentados representam uma média de 50 realizações.

Foi simulado o crescimento de uma nova fase nos contornos de grão de uma matriz de elipsoides, conforme representação gráfica da Figura 1. A matriz inicial composta de elipsoides foi escolhida de modo a representar grãos deformados. O número de elipsoides foi mantido igual a 128 em todos os casos.

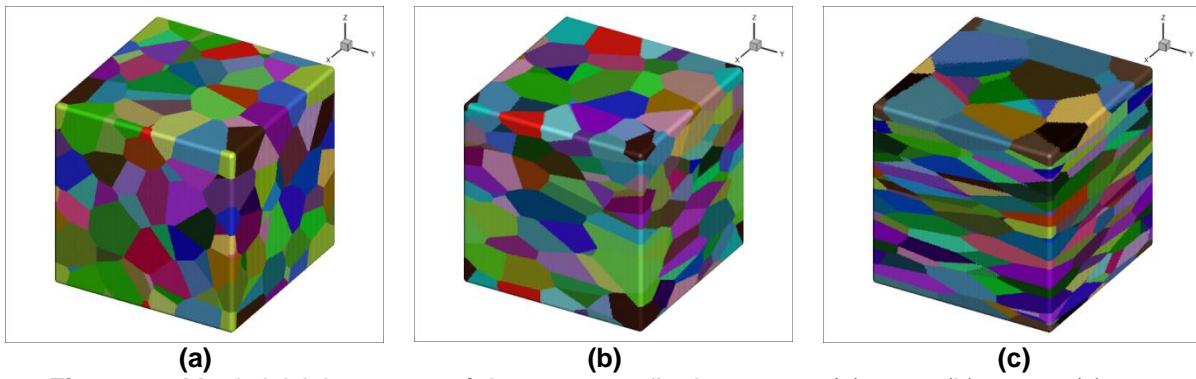


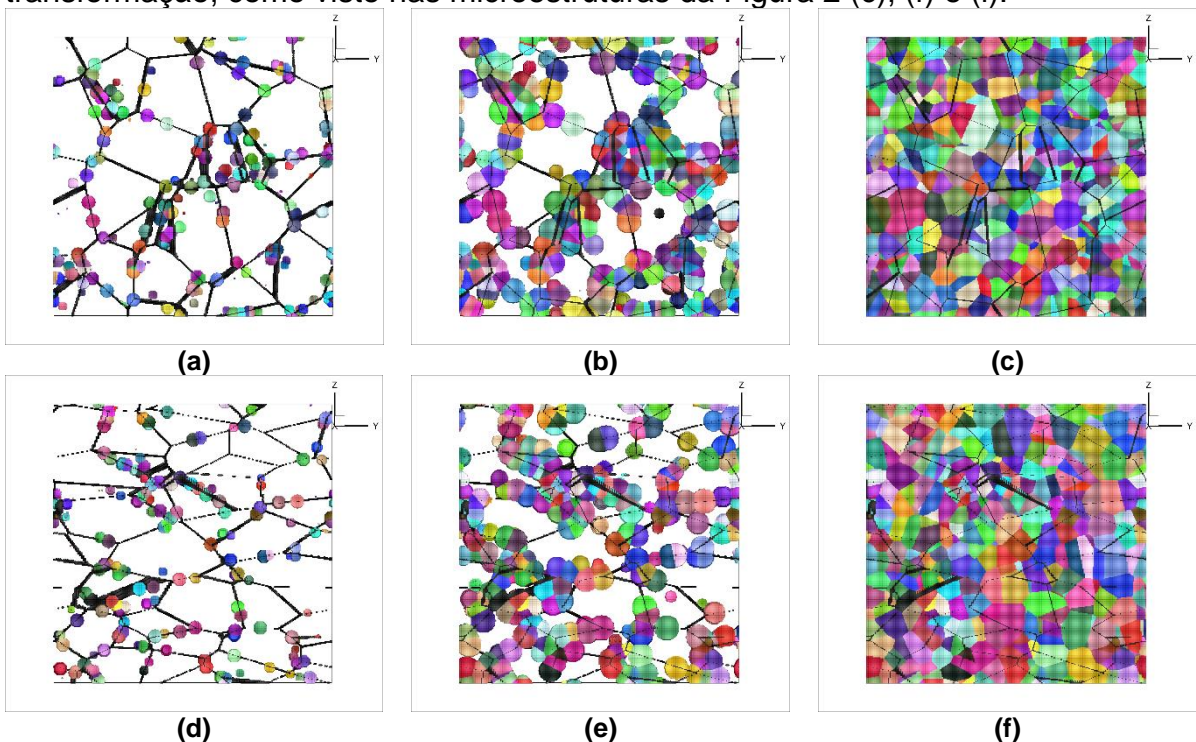
Figura 1 – Matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 1:1:1, (b) 2:2:1 e (c) 4:4:1

A partir da matriz de elipsoides, foi simulado o crescimento de uma nova fase nucleada nas suas interfaces. Manteve-se o número de núcleos da nova fase constante e igual a 3000 em todos os casos.

2.4 Resultados e discussão

2.4.1 Evolução Microestrutural

A Figura 2 apresenta a evolução microestrutural da nucleação nas interfaces da matriz inicial. Foi realizado cortes em todas as seções da matriz com 3000 núcleos nas interfaces, na seção X, nos planos com 10%, 50% e 100% de transformação respectivamente, para cada razão. As interfaces da matriz inicial estão destacadas em preto e a distribuição dos núcleos estão nos contornos de grão validando o tipo de nucleação proposto. Como observado na Figura 1, com o aumento da razão de aspecto houve um alongamento dos grãos. Entretanto, a morfologia dos grãos nucleados nas interfaces das matrizes são equiaxiais. Deste modo, não houve uma mudança visível na morfologia dos grãos após o término da transformação, como visto nas microestruturas da Figura 2 (c), (f) e (i).



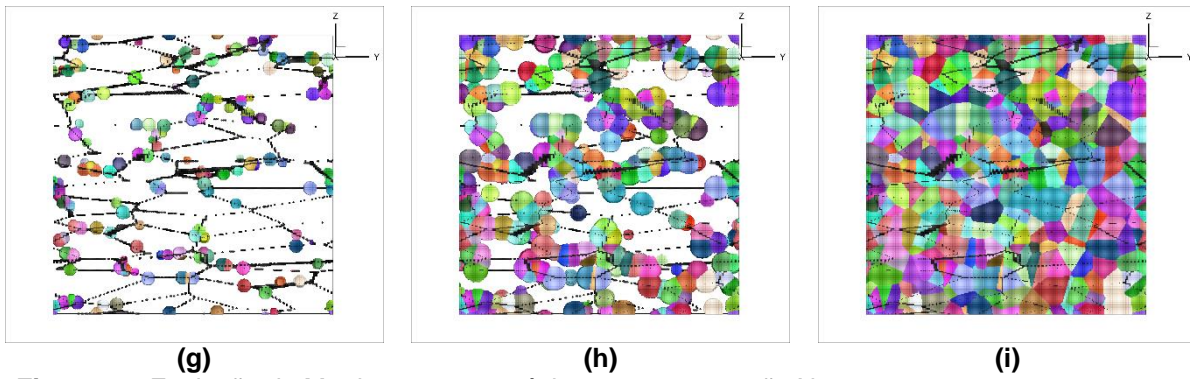


Figura 2 – Evolução da Matriz com 3000 núcleos, corte na seção X, com $V_v = 0.1$, $V_v = 0.7$ e $V_v = 1$. Com razão de aspecto: 1:1:1, 2:2:1 e 4:4:1, respectivamente.

2.4.2 Cinética

Na figura 3 e 4, são apresentadas a cinética de transformação dada pela fração volumétrica versus tempo para transformações da matriz com crescimento esférico e elipsoidal respectivamente. Nota-se que tanto para o caso esférico quanto para o caso elipsoidal que a curva simulada tem um bom acordo com o modelo de Cahn, validando a simulação.

No caso da matriz com crescimento elipsoidal, foi observado que o aumento da razão de aspecto gera um pequeno desvio da simulação para o modelo. Os grãos recristalizados nucleados nas interfaces da matriz inicial são representados por poliedros de Poisson-Voronoi. A escolha desse poliedro é pelo fato dele resultar de um crescimento em formato esférico, com o mesmo tamanho em todas as direções satisfazendo a suposição do formato esféricos dos grãos na teoria de JMAK. Sabe-se que os grãos reais não são exatamente poliedros de Voronoi, devido a isso era esperado um pequeno desvio da curva simulada comparada com Cahn.

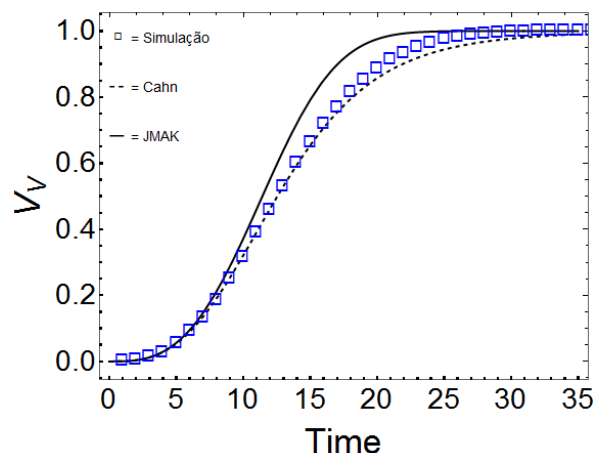


Figura 3 – Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 3000 núcleos nas interfaces.

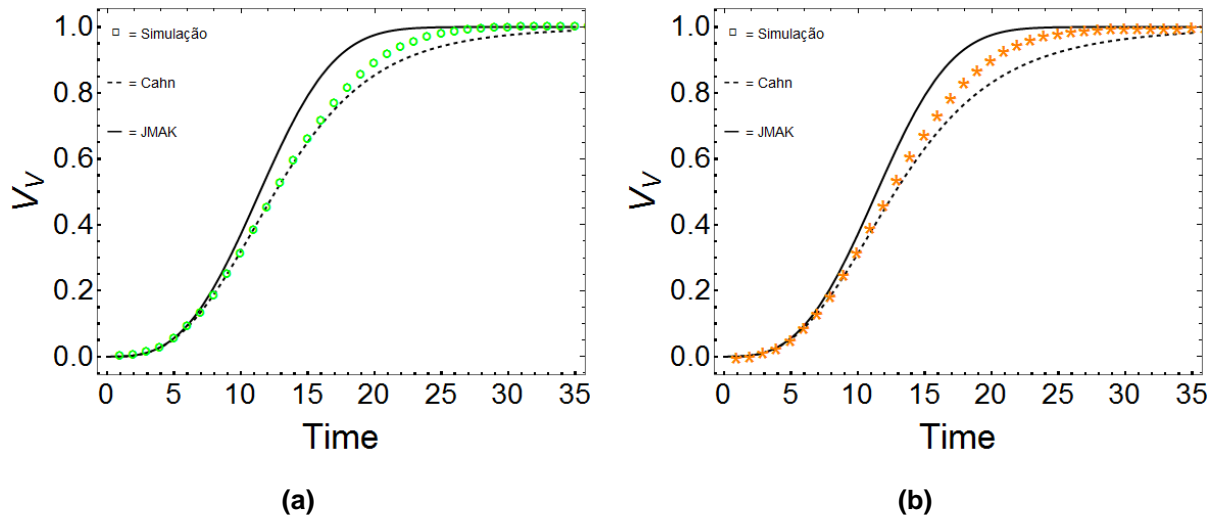


Figura 4 – Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 3000 núcleos nas interfaces com razão de aspecto 2:2:1 em (a) e 4:4:1 em (b).

3 CONCLUSÃO

A simulação computacional e os modelos analíticos foram utilizadas para estudar o efeito da nucleação nos contornos de grãos na matriz com crescimento esférico e elipsoidal. As principais conclusões são:

- 1 A distribuição dos núcleos ocorreu nas interfaces da matriz inicial.
- 2 A cinética de transformação da matriz com crescimento esférico e crescimento elipsoidal com a quantidade de núcleos nas interfaces obtiveram curvas distintas.
- 3 As simulações tendo a matriz com crescimento esférico apresentaram um bom acordo com o modelo analítico de Cahn.
- 4 As simulações tendo a matriz com crescimento elipsoidal apresentaram um aumento do desvio da curva do modelo de Cahn com o aumento da razão de aspecto simulado.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) - Código Financeiro 001. Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPQ e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- [1] Johnson, W. A., Mehl, R. F. Reaction Kinetics In Processes of Nucleation And Growth. Transactions Aime, V. 135, P. 416-441, 1939. 55.
- [2] Avrami, M. J. Kinetics Of Phase Change I General Theory. The Journal Of Chemical Physics, V. 7, N. 12, P. 1103-1112, 1939.

- [3] Avrami, M. J. Kinetics Of Phase Change Ii Transformation-Time Relations For Random Distribution Of Nuclei. *The Journal Of Chemical Physics*, V. 8, N. 2, P. 214-224, 1940.
- [4] Avrami, M. J. Kinetics Of Phase Change Iii Granulation, Phase Change And Microstructure Kinetics Of Phase Change. *The Journal Of Chemical Physics*, V. 9, N. 2, P. 177-184, 1941.
- [5] Kolmogorov, N. A. The Statistics Of Crystal Growth In Metals. *Isvestiia Akademii Nauk Sssr – Serii Matematicheskaja*, V. 1, P. 333 – 359, 1937.
- [6] Tanaka, T. Controlled Rolling Of Steel Plate And Strip. *International Metals Reviews*, N. 4, P. 185-212, 1981.
- [7] Cahn, J. W. The Kinetics Of Grain Boundary Nucleated Reactions. *Acta Metallurgica*, V. 4, N. 5, P. 449–459, 1956.
- [8] Villa E., Rios P.R. Transformation Kinetics For Nucleation On Random Planes And Lines. *Image Analysis Stereology*, Vol. 30, P.153-165, 2011.
- [9] Rios PR, Pereira LO, Oliveira FF, Assis WLS, Castro JA. Impingement Function For Nucleation On Non-Random Sites. *Acta Materialia*. 2007;55(13):4339-4348.
- [10] Rios, P.R; Villa, E. Transformation Kinetics For Inhomogeneous Nucleation. *Acta Materialia*, Vol. 57, N°4, P.1199-1208, 2009.
- [11] Cahn JW. The Time Cone Method For Nucleation And Growth Kinetics On A Finite Domain. *MRS Proceedings*. 1995;398:425
- [12] Assis, W. L. S. Investigação Do Efeito Da Nucleação, Da Velocidade De Crescimento E Da Distribuição Da Energia Armazenada Na Recristalização Pelo Método Do Autômato Celular Em Três Dimensões. *Dissertação De Mestrado*, Uff – Volta Redonda, 2006.