

ESTUDO GERAL DA CURVATURA DOS GRÃOS E APRESENTAÇÃO DE MODELOS GEOMÉTRICOS⁽¹⁾

Gláucio Soares da Fonseca⁽²⁾

Paulo Rangel Rios⁽³⁾

Resumo

A curvatura média de grãos individuais, dos contornos de grão e das arestas dos grãos foram medidas em uma liga Al-1% massa Mn. Modelos geométricos simples foram derivados para essas três quantidades como função do comprimento médio das intersecções dos grãos. Os modelos mostram uma boa concordância com os dados experimentais

Palavras-chave: Curvatura; Crescimento de grão; Microestrutura.

¹ 60° Congresso Anual da ABM – Internacional; 25 a 28 de julho de 2005, Minas Centro – Centro de Convenções e Feiras. Belo Horizonte – MG – Brasil.

² Engenheiro Químico, Mestre em Engenharia Metalúrgica, aluno do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF. kottel@terra.com.br

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

INTRODUÇÃO

Em 1967 dois trabalhos apareceram ao mesmo tempo (1,2) com a idéia da curvatura média da interface. Esses dois trabalhos reportaram métodos estereológicos pelos quais a curvatura média da interface poderia ser obtida por medidas realizadas em um seção planar. Ao lado da 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 integral da curvatura média, H , são importantes descritores da microestrutura (3).

Para o crescimento de grão a curvatura do contorno é muito importante porque ela é a força motriz para a migração do contorno de grão. Como é bem conhecido a velocidade do contorno, v , em um certo ponto no contorno é proporcional a curvatura média local, h :

$$v = \gamma M h \quad (1)$$

onde M é a mobilidade do contorno de grão e γ é a energia do contorno de grão por unidade de área.

É importante deixar claro a definição de curvatura adotada aqui. Nesse trabalho a sugestão de Taylor (4) é seguida. Taylor sugeriu definir a curvatura média local como a soma das duas principais curvaturas, k_1 e k_2 :

$$h = k_1 + k_2 \quad (2)$$

Essa definição é diferente da definição de DeHoff (2) da curvatura média que inclui um fator de $\frac{1}{2}$. A sugestão de Taylor é boa, já que a velocidade local de contorno de grão é proporcional à curvatura local do contorno de grão: $k_1 + k_2$.

A curvatura local é difícil de medir e, H , a curvatura média por toda a área interfacial, S , é a quantidade que é normalmente usada:

$$H = \frac{\int (k_1 + k_2) dS}{\int dS} \quad (3)$$

Quando se considera a importância da curvatura do contorno de grão no que diz respeito ao crescimento de grão é surpreendente que tenha sido medida raramente (5-7). Haroun e Budworth (5) em um trabalho de 1968 mediram a curvatura, mas usaram um método aproximado. Mais adiante, em 1992, Patterson e Liu (6) mediram a curvatura do contorno de grão em Alumínio puro e mais recentemente Rios e Fonseca mediram em uma liga Al-1% massa Mn (7). Os trabalhos acima se concentraram na curvatura do contorno de grão no contexto do ancoramento por partícula (8,9). Por outro lado, DeHoff e Liu (10) mediram a integral da curvatura para examinar a relação entre tamanho de grão e sua topologia.

No caso específico da estrutura do grão pode-se distinguir (3) três curvaturas descritoras, dependendo de como o policristal é visto. Em cada caso uma medida particular realizada em uma seção plana é relevante como é descrito a seguir. Vale a pena lembrar o leitor que quando se compara os resultados presentes com os de outros autores (1,3), tem que ser levado em conta que nesse trabalho a curvatura média foi definida como a soma das duas curvaturas principais (4) como mostra a Eq. 2. Portanto, a seguir as curvaturas médias são multiplicadas por um fator de 2 comparadas aos de outros autores(1-3,11).

O primeiro caminho de olhar a estrutura do grão é considerá-lo como uma coleção de interfaces individuais. Esse ponto de vista é particularmente relevante para o crescimento de grão porque na Eq. 1 a curvatura se refere a curvatura do contorno de grão e não a curvatura de um grão individual. Nesse caso, a expressão para a curvatura média é (2,3,7):

$$H_c = \frac{2\pi T_A}{S_V} \quad (4)$$

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 tangencia entre uma linha teste e um traço curvado do contorno de grão em uma seção por unidade de área (2,11). 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):

$$H_g = \frac{2\pi N_A}{S_V} \quad (5)$$

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, os autores não consideraram o sinal da curvatura em cada contorno de grão como é feito no terceiro ponto de vista descrito abaixo.

Um terceiro caminho de olhar para um policristal é reconhecer que, quando ele é separado em grãos poliedrais então cada elemento da superfície curvada do contorno de grão em um grão particular está combinado exatamente por um elemento de igual e oposta curvatura no grão que era incidente em cima dele no policristal (3). Assim a integral da curvatura das faces curvadas dos grãos, levando em consideração o sinal da curvatura em cada contorno de grão será zero. A curvatura líquida reside inteiramente nas arestas. Nesse caso, a medida

chave é P_A , o número de pontos triplos por unidade de área de uma seção plana. A integral da curvatura da aresta é o produto do comprimento da aresta por unidade de volume, L_V , vezes o ângulo diedral $\pi/3$, não esquecendo que existem três ângulos diedrais por aresta (3), assim a integral da curvatura da aresta se torna igual a πL_V . Dividindo pela área total de grãos desintegrados $2 S_V$, obtém-se:

$$H_a = \frac{\pi L_V}{2 S_V} \quad (6)$$

Como $L_V = 2P_A$ (11)

$$H_a = \frac{\pi P_A}{S_V} \quad (7)$$

O subscrito a é adicionado em H para enfatizar que está se referindo somente a curvatura que reside nas arestas

Nesse trabalho, todas as três curvaturas médias descritoras são medidas em uma liga de Al-1% massa Mn de alta pureza e os resultados são interpretados com a ajuda de modelos geométricos simples.

MATERIAIS E MÉTODOS

Uma liga de alta pureza de Al-1% massa Mn 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 (7,13) e em Rios e Gottstein (14). 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 , foi medida por técnicas metalográficas padrão (11). A integral da curvatura do contorno de grão foi medida usando o método da tangente de DeHoff (2,11). 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

A seguir as amostras que foram deformadas 40% e 80%, serão referidas como amostras “40%” ou “80%”, respectivamente. Os resultados mostrados nas Figuras 1, 2 e 3, as curvaturas estão plotadas contra a temperatura e nas Figuras 4, 5 e 6, H_c , H_g e H_a são plotadas contra o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos, λ^{-1} . Nessas figuras são mostradas uma boa concordância entre teoria e experimento e o grupo de pontos indicado por uma seta será discutido na próxima seção.

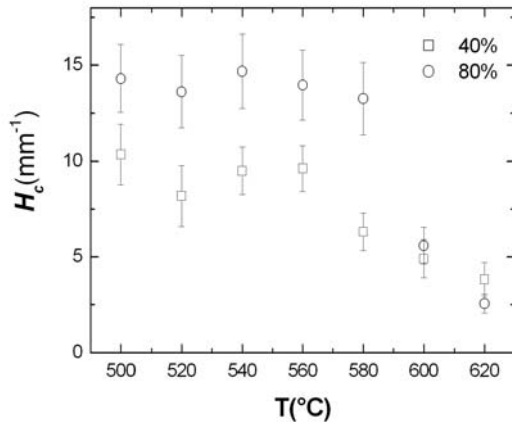


Figura 1. A curvatura média do contorno de grão, H_c , versus Temperatura.

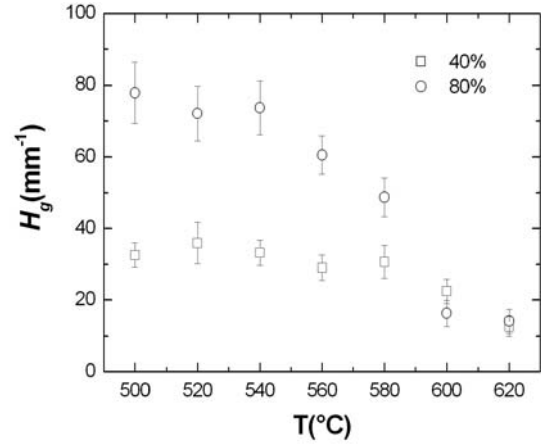


Figura 2. A curvatura média do grão, H_g , versus Temperatura.

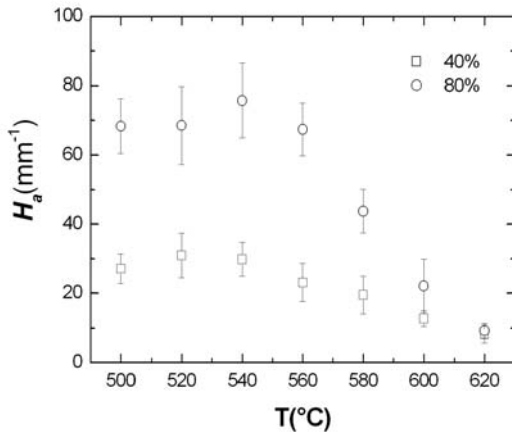


Figura 3. A curvatura média da aresta, H_a , versus Temperatura.

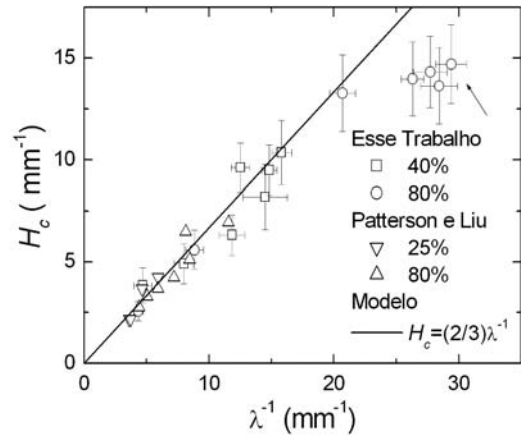


Figura 4. H_c versus λ^{-1} . A linha sólida representa Eq.12

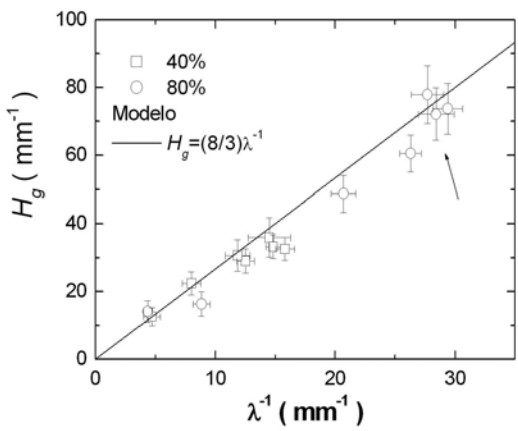


Figura 5. H_g versus λ^{-1} . A linha sólida representa Eq.13.

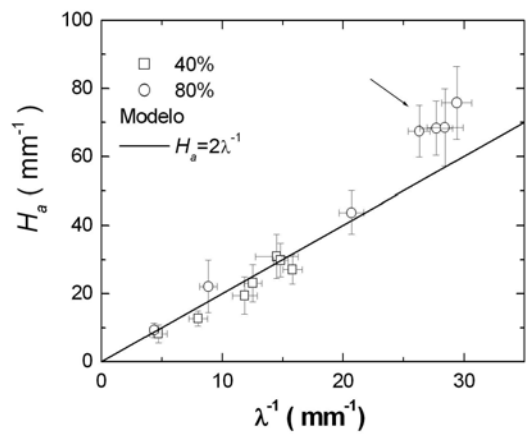


Figura 6. H_a versus λ^{-1} . A linha sólida representa Eq.16.

DISCUSSÃO

A Figura 1 mostra que até 560°C a curvatura do contorno de grão para as amostras 40% e 80% permanece constante e a partir dessa temperatura começa a diminuição da curvatura. Isso é explicado pelo ancoramento do contorno de grão pelas partículas de Al_6Mn que impedem o crescimento de grão até aproximadamente 560°C (7). Com o aumento da temperatura as partículas se dissolvem e ocorre o crescimento de grão. Nas temperaturas iniciais, os grãos são mais “curvados”, com aumento da temperatura, os grãos crescem e os contornos se tornam mais “retos”, diminuindo assim sua curvatura. Um outro ponto a analisar é que nas temperaturas de 500°C a 560°C a curvatura nas amostras 80% é maior que nas amostras 40% e tendem ao mesmo valor nas temperaturas de 600°C a 620°C. Como o tamanho de grão recristalizado é menor nas amostras 80% que nas amostras 40%, acarreta em um maior número de grãos nas amostras 80%. Com isso os grãos nas amostras 80% se “curvam mais” para manter o equilíbrio. Nas temperaturas finais não há o ancoramento por partículas, então os grãos nas amostras 40% e 80% vão tender ao mesmo tamanho e com a mesma curvatura.

As Figuras 2 e 3 mostram um comportamento similar ao descrito no parágrafo anterior.

Uma relação entre a curvatura do contorno de grão e o comprimento médio das intersecções, λ , foi proposta em trabalhos anteriores (7,9). Isso será derivado aqui de uma maneira mais geral. Durante o crescimento de grão o volume é conservado, de modo que o volume de grãos que desaparecem corresponde exatamente ao aumento de volume dos grãos que crescem. O crescimento ou desaparecimento do grão são realizados pela migração do contorno. dV_S representa o volume varrido pelo movimento do contorno de grão. Uma expressão aproximada para o volume varrido (7,9) pode ser encontrada considerando N grãos iguais de volume médio V . Em uma situação idealizada $N - dN$ grãos crescem por dV enquanto dN grãos de volume u_m desaparecem, logo o volume total, $V_T = NV = (N-dN)(V+dV)$, permanece constante. O volume varrido devido ao deslocamento dos contornos é $dV_S = (N-dN)dV = NdV$. Como resultado do movimento do contorno de grão, a área interfacial total S_T diminui por dS_T . A curvatura média do contorno de grão pode ser encontrada por (1,4,7,9):

$$H_c = -\frac{dS_T}{dV_S} \quad (8)$$

O sinal de menos é incluído porque dS_T é negativo assim a curvatura média se torna positiva. Uma discussão mais detalhada da Eq. 8 pode ser encontrada em Rios e Fonseca (7). O número total de grãos, N , é igual a V_T/V e a área interfacial por unidade de volume, S_V é igual a S_T/V_T . Portanto, a Eq. 8 se torna:

$$H_c = -V \frac{dS_V}{dV} \quad (9)$$

Para grãos iguais, pode-se considerar que a área de cada grão seja dada por $S = \alpha L^2$ e seu volume por $V = \beta L^3$, onde L é uma escala conveniente de

comprimento para o grão. S_V é então igual a $(\alpha/2\beta)L^{-1}$. O comprimento médio das intersecções, λ , pode ser geralmente encontrado, pelo volume, V , e pela área da superfície, S , de um simples grão por (11):

$$\lambda = \frac{4V}{S} \quad (10)$$

ou

$$\lambda = \frac{4\beta L}{\alpha} \quad (11)$$

Substituindo S_V e V na Eq. 9 e usando a Eq.11 finalmente obtém-se:

$$H_c = \frac{2}{3}\lambda^{-1} \quad (12)$$

A Figura 4 mostra a comparação entre a Eq. 12 e os dados experimentais. As medidas experimentais de curvatura em Al puro de Patterson e Liu (6) são também incluídas. Considerando a simplicidade desse modelo a concordância com a Figura 4 é notável. A linha sólida de melhor ajuste não é mostrada para evitar sobrecarregar a Figura 4. Os pontos do lado direito da Figura 4 indicados por uma seta ficaram fora do modelo acima. Esses pontos correspondem as menores temperaturas de tratamento térmico nas amostras de 80%. Nessas temperaturas, a força de ancoramento devido à dispersão de partículas nas amostras (7,12) era grande o suficiente para ancorar os grãos quando a recristalização terminou. Nesse caso, os contornos de grão imediatamente depois da recristalização não tiveram a possibilidade de encontrar o equilíbrio nas arestas e nos contornos. A curvatura dos contornos de grão, H_C , exibida por essas amostras foi menor que a prevista pelo modelo. Portanto, esses contornos são “mais retos” do que seriam se seguissem a Eq. 12. Esse ponto será analisado mais tarde nesse trabalho.

Para encontrar uma relação entre a curvatura média de grãos individuais, H_g , e o comprimento médio das intersecções dos grãos, considerou-se simplesmente que os grãos tem forma esférica (10). Para esferas iguais de raio R , é encontrada diretamente uma relação entre a curvatura média e o comprimento médio das intersecções dos grãos, lembrando que $\lambda = 4R/3$ (11):

$$H_g = \frac{8}{3}\lambda^{-1} \quad (13)$$

A Eq. 13 é comparada com as medidas experimentais na Figura 5. A concordância é boa. A linha sólida de melhor ajuste não é mostrada para evitar sobrecarregar a Figura 5.

A relação entre a curvatura média das arestas, H_a , e o comprimento médio das intersecções dos grãos pode ser obtida observando que a integral da curvatura de grãos individuais é igual a integral da curvatura nas arestas mais a integral da curvatura nos contornos de grão:

$$H_g S_V = H_c S_V + H_a S_V \quad (14)$$

ou simplesmente:

$$H_g = H_c + H_a \quad (15)$$

consequentemente:

$$H_a = 2\lambda^{-1} \quad (16)$$

A Eq. 16 é plotada na Figura 6 junto com dados experimentais. A concordância é boa exceto por um grupo de pontos indicados por uma seta na Fig.6

O grupo de pontos, fora do modelo, que foi mencionado acima é a conexão com a curvatura do contorno de grão. Na Figura 4, eles estão abaixo da linha do modelo. Na Figura 6, os mesmos pontos estão acima da linha do modelo indicando uma curvatura maior nas arestas. Portanto, os desvios estão em sentidos opostos nas Figuras 4 e 6. 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 Eqs. 12 e 16. Observando que na Figura 5, a curvatura média do contorno de grão desse grupo de amostras, indicado por uma seta, não teve um desvio significativo da Eq. 13. A curvatura da aresta é essencialmente uma função do comprimento da aresta por unidade de volume. Portanto, é razoável supor que a menor curvatura do contorno de grão foi compensada por um maior comprimento da aresta por unidade de volume e como resultado, a curvatura média do grão, mostrada na Fig. 5, segue a linha do modelo. Em outras palavras, esse grupo de amostras tem “mais” curvatura nas arestas que nos contornos quando comparadas com as amostras restantes.

Crescimento de grão é usualmente estudado medindo o comprimento médio das intersecções, mas os resultados presentes sugerem que essa informação importante pode ser recolhida das medidas de curvatura. Vale mencionar que a boa concordância desses modelos com os experimentos é consistente com DeHoff e Liu (10) que concluíram que a aproximação de uma esfera para forma do grão foi uma “boa surpresa”. Esses modelos podem ser completamente verificados com medidas realizadas em seções planas.

CONCLUSÕES

Medidas de curvatura podem fornecer informações que são muito importantes para o crescimento de grão. Modelos geométricos foram propostos relacionando a curvatura média com o comprimento médio das intersecções dos grãos, λ , que é uma medida trivial. Esses modelos mostraram uma boa concordância com medidas realizadas em uma liga Al-1%massa Mn. Para finalizar, os resultados teóricos para cada curvatura média estão juntos com a expressão correspondente usada na determinação experimental dela como mostrado abaixo:

Curvatura média do contorno de grão, H_c :

$$H_c = \frac{2\pi T_A}{S_V} = \frac{2}{3}\lambda^{-1}$$

Curvatura média de grãos individuais, H_g :

$$H_g = \frac{2\pi N_A}{S_V} = \frac{8}{3}\lambda^{-1}$$

Curvatura média das arestas, H_a :

$$H_a = \frac{\pi P_A}{S_V} = 2\lambda^{-1}$$

Agradecimentos

Esse trabalho teve o suporte do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoa de Nível Superior, CAPES e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, 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 DeHoff, R.T. The Geometrical meaning of the integral mean curvature. **Microstructural Science**, v.5, p.331-348, 1977.
- 4 Taylor, J.E. II – Mean curvature and weighted mean curvature. **Acta Metall. Mater**, v.40, p. 1475-1485, 1992.
- 5 -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
- 6 Patterson, B.R.; Liu, Y. Relationship between grain boundary curvature and grain size **Metall Trans**, v.23A, p.2481-2482, 1992.
- 7 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.
- 8 Rios, P.R. A theory for grain boundary pinning by particles. **Acta Metall**, v.35, p.2805-2814, 1987.
- 9 Rios, P.R. On the relationship between pinning force limiting grain radius. **Scripta Mater**, v.34, p.1185-1188, 1996.
- 10 DeHoff, R.T.; Liu, G.Q. On the relation between grain size and grain topology. **Metall Trans A**, v.16A, p.2007-2011,1985.
- 11 Russ, J.C.; DeHoff, R.T. **Practical Stereology** , 2nd Edition, Kluwer Academic, New York EUA, 2000.
- 12 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.
- 13 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.

GENERAL STUDY OF THE GRAINS CURVATURE AND PRESENTATION OF GEOMETRICAL MODELS⁽¹⁾

Gláucio Soares da Fonseca⁽²⁾

Paulo Rangel Rios⁽³⁾

Abstract

The average curvature of individual grains, of grain boundaries and of grain edges were measured in an Al-1mass% Mn alloy. Simple geometrical models relating these three quantities to the mean intercept length of the grains were derived. The models showed good agreement with experimental data.

Key-words: Curvature; Grain growth; Microstructure.

¹ *60th Annual ABM International Congress; 25 - 28 July, 2005, Minas Centro – Centro de Convenções e Feiras. Belo Horizonte – MG – Brasil.*

² *Chemical Engineer, Metallurgical Master Engineer and Student of the degree Doctor course in Metallurgical Engineering at Universidade Federal Fluminense – UFF. kottel@terra.com.br*

³ *Professor Ph. D coordinator of the Doctor and Master degree course in Metallurgical Engineering of UFF/ EEIMVR. prrios@metal.eeimvr.uff.br.*