

TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS COM NUCLEAÇÃO POR TAXA DE NUCLEAÇÃO CONSTANTE*

Felipe da Silva Siqueira¹

André Luiz Moraes Alves²

Guilherme Dias da Fonseca³

Daniel Gomes de Souza dos Santos⁴

Aline Cristine Lemos Duarte⁴

Wesley Luiz da Silva Assis²

Paulo Rangel Rios²

Resumo

Com o aumento da complexidade dos materiais metálicos, duas ou mais fases produto podem nuclear simultaneamente durante uma transformação de fase. A nucleação de novos grãos pode ocorrer por saturação de sítios ou por taxa constante. Neste contexto, esse trabalho busca estudar a influência da transformação simultânea com nucleação por taxa constante de duas fases produto na cinética, na microestrutura e na distribuição do tamanho de grão em uma região tridimensional. A efeito de comparação, também foi realizado o estudo de reações em que uma fase nucleia por saturação de sítios e a outra fase, por taxa constante e ambas iniciam sua transformação no instante inicial, de forma simultânea. Os resultados obtidos computacionalmente foram comparados às equações analíticas, apresentando ótima concordância entre os modelos. Foi observado que parâmetros microestruturais como tamanho médio de grãos e morfologia das interfaces podem auxiliar o pesquisador a identificar o tipo de nucleação, seja por saturação de sítios, seja por taxa constante.

Palavras-chave: Transformação de fase; Saturação de sítios; Tamanho de grão; Simulação computacional.

SIMULTANEOUS TRANSFORMATIONS WITH NUCLEATION BY CONSTANT NUCLEATION RATE

Abstract

With the increase of the complexity of the materials, two or more phases can take place simultaneously during a phase transformation. The new grains nucleation may occur by site saturation or by constant rate. In this context, this work aims to study the influence of simultaneous transformations with nucleation by constant rate in the kinetics, microstructure and grain size distributions in a tridimensional space. Also, for the purpose of comparison, a study of reactions in which one phase takes place by site saturation and the other occurs by constant rate and both start the transformation together was done. The computational results obtained were compared to analytical equations showing great agreement between models. According to the results, one observed that microstructure parameters like mean grain size and grain boundary morphology can help the researcher to identify the nucleation type either by site saturation or by constant rate.

Keywords: Phase transformations; Site saturation; Grain size; Computer simulation.

¹ Engenharia Metalúrgica, Graduando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Av. dos Trabalhadores, 420, CEP 27255-125, Vila Santa Cecília, Volta Redonda, RJ, Brasil.

² Engenharia Metalúrgica, Doutor, professor, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Vila Santa Cecília, Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Engenharia Metalúrgica, Doutorando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Vila Santa Cecília, Volta Redonda, RJ, Brasil.

⁴ Engenharia Metalúrgica, Mestrando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Vila Santa Cecília, Volta Redonda, RJ, Brasil.

1 INTRODUÇÃO

A maioria das transformações de fase se iniciam com a formação de pequenos núcleos de uma nova fase que crescem até a completa transformação. As etapas de formação de uma nova fase são denominadas nucleação e crescimento. A cinética formal de Johnson e Mehl [1], Kolmogorov [2] e Avrami [3], conhecida também por modelo JMAK, é um dos modelos mais utilizados para o modelamento dessas transformações por nucleação e crescimento. Ele considera a transformação de uma fase matriz em uma fase produto, obtendo-se assim uma medida global da cinética de transformação.

A maior parte dos modelos para reações de transformação de fase envolvendo nucleação e crescimento supõe a existência de apenas uma fase, que nucleia e cresce ao longo do tempo. Porém, em situações mais complexas, pode ocorrer a transformação de uma fase inicial em mais de uma fase produto. Estas fases distintas nucleiam no mesmo instante e crescem de maneira independente umas das outras, neste caso tem-se uma transformação denominada simultânea.

Rios e Villa [4] propuseram um modelo analítico matematicamente exato para o caso de transformações simultâneas envolvendo mais de uma fase. Anteriormente, Vandermeer e Juul-Jensen [5,6] propuseram uma metodologia inicial para modelar transformações simultâneas aplicadas à recristalização em uma matriz com componentes de textura. Jones e Bhadeshia [7,8] também propuseram um modelo similar capaz de descrever a precipitação de mais de uma fase.

Um exemplo real de transformações simultâneas acontece durante a recristalização de chapas de aços ultrabaixo carbono (*“interstitial free”*) [9]. Podem ocorrer nessas regiões recristalizadas diferentes componentes de textura cristalográfica: predominantemente fibra alfa ou fibra gama, além do componente “aleatório”. Cada região correspondente a um componente de textura tem sua própria taxa de nucleação e o crescimento das regiões ocorre simultaneamente.

O modelo de Rios e Villa [4], ao se apropriar do princípio da superposição para lidar com essas transformações, é mais geral, podendo ser, portanto, utilizado para modelar transformações de fase apenas se conhecendo as equações cinéticas individuais das fases.

Apesar de ser possível obter os valores médios tanto da fração volumétrica transformada como da área interfacial por unidade de volume, em função do tempo, o modelo analítico de Rios e Villa [4] é incapaz de revelar a evolução das microestruturas das transformações. Para tanto, faz-se o uso das simulações computacionais permitindo assim obter a evolução microestrutural ao longo do tempo, além de ser possível realizar a quantificação de outros parâmetros importantes como a distribuição do tamanho médio dos grãos de cada fase.

Também por meio de simulação computacional, Frost [10] comparou as morfologias das interfaces que são formadas durante o encontro dos núcleos. Dentre as que ele relatou, destaca-se aquelas em que a velocidade de crescimento é constante: uma microestrutura com polígonos de Voronoi, onde o encontro dos grãos que surgem todos no mesmo instante de tempo formam contornos de linha reta; e a microestrutura primeiramente relatada por Johnson e Mehl [1], em que os grãos que nucleiam sequencialmente a uma taxa constante ao longo do tempo formam, ao se encontrar, contornos que são segmentos de uma hipérbole.

Alves, Assis e Rios [11] realizaram um estudo sobre as transformações simultâneas utilizando o modelo analítico de Rios e Villa [4] e simulação computacional, porém, no trabalho, ambas as fases surgiram utilizando a teoria de nucleação por saturação

de sítios. Neste trabalho fez-se uso de metodologia semelhante, contudo foi implementado a nucleação por taxa constante, onde um determinado número de núcleos surge por unidade de volume por unidade de tempo, ou seja, a nucleação também ocorre durante o crescimento das fases.

Estudou-se, portanto, a influência da transformação simultânea com nucleação por taxa constante de duas fases produto na cinética, na microestrutura e interfaces dos grãos e na distribuição do tamanho de grão em uma região tridimensional. A efeito de comparação, também foi realizado o estudo de reações em que uma fase nucleia por saturação de sítios e a outra fase, por taxa constante e ambas iniciam sua transformação no instante inicial, de forma simultânea.

2 MODELO ANALÍTICO PARA TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS

Uma transformação simultânea é aquela em que os núcleos de duas ou mais fases produto surgem em um intervalo de tempo bem pequeno, próximo de zero, $\Delta t \approx 0$. Assim, é possível considerar que essas fases nucleiam juntas no tempo $t = 0$, ou seja, o início da transformação de cada fase ocorre no mesmo instante zero embora o surgimento dos núcleos possa ser sequencial ao longo do tempo, como é o caso da teoria de nucleação por taxa constante.

Na primeira situação abordada neste trabalho, as fases produto 1 e 2 nuclearam por taxa de nucleação constante. Assim sendo, ambas as fases são modeladas individualmente pela Equação (1). Onde I_V é a taxa de nucleação, I , por unidade de volume por unidade de tempo. Já na segunda situação, apenas a fase produto 2 é nucleada por taxa de nucleação, enquanto a fase 1 é nucleada por saturação de sítios. Logo, a fase produto 2 é bem modelada pela Equação (1) e a fase produto 1, pela Equação (2), onde N_V é o número de núcleos, N , por unidade de volume.

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

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_V G^3 t^3\right) \quad (2)$$

A seguir serão utilizados dois termos adicionais que convém esclarecê-los: os conceitos de experimental e teórico. A medida experimental é aquela medida realizada diretamente a partir de uma microestrutura transformada. Já a medida teórica é aquela que não considera a interferência de outra fase na reação em estudo. Isto significa dizer que neste caso considera-se que a fase 1 esteja se transformando sozinha sem levar em conta a existência da fase 2. Por isso trabalha-se com as medidas experimentais, pois elas consideram o efeito de interferência (*impingement*) de uma fase produto sobre outra fase produto. As medidas experimentais estão denotas pelo sobrescrito asterisco (*) nas próximas equações. Por conveniência, o termo experimental será omitido no que se segue.

Através do princípio da superposição abordado por Rios e Villa [4], obtém-se tanto parâmetros globais como parâmetros individuais de cada fase produto ao longo da transformação simultânea. A Equação (3) mostra uma expressão teórica onde é possível utilizar equações de reações simples para se obter um modelo para reações simultâneas.

$$V_V(t) = 1 - (1 - V_{V1}(t))(1 - V_{V2}(t)) \quad (3)$$

A fração volumétrica individual das fases 1 e 2 é medida por $V_{V1}(t)$ e $V_{V2}(t)$, respectivamente. Assim sendo, a depender do caso analisado, $V_{V1}(t)$ e $V_{V2}(t)$ assume a forma das Equações (1) e (2).

Considerando V_V^* como a fração volumétrica e S_V^* a quantidade de área interfacial entre material transformado e não transformado por unidade de volume, é possível obter ambos parâmetros da fase produto 1 através das Equações (4) e (5).

$$V_{V1}^*(t) = \int_0^t \frac{1-V_V(s)}{1-V_{V1}(s)} \frac{\partial V_{V1}(s)}{\partial s} ds \quad (4)$$

$$S_{V1}^*(t) = \frac{1-V_V(t)}{1-V_{V1}(t)} S_{V1}(t) \quad (5)$$

Expressões análogas às Equações (4) e (5) podem ser obtidas para a fase produto 2 apenas substituindo o índice 1 por 2. De posse dessas duas últimas equações é possível encontrar a fração volumétrica total e a área interfacial total por unidade de volume através das Equações (6) e (7).

$$V_V(t) = V_{V1}^*(t) + V_{V2}^*(t) \quad (6)$$

$$S_V(t) = S_{V1}^*(t) + S_{V2}^*(t) \quad (7)$$

As Equações (1) e (2) aqui apresentadas compõem o conhecido modelo de JMAK [1–3]. As Equações (3-7) foram propostas e detalhadas no trabalho de Rios e Villa [4]. Todas elas foram elucidadas aqui apenas por conveniência.

3 METODOLOGIA

Utilizou-se o método computacional denominado Cone Causal [11,12] para a realização da simulação de reações de nucleação e crescimento de duas fases distintas que ocorrem de forma simultânea.

Todas as simulações foram conduzidas em uma matriz cúbica contendo uma malha de 300 x 300 x 300 células cúbicas. Para um melhor dimensionamento da matriz, a aresta de cada célula unitária mede 1/3 μm . Assim a matriz possui 100 μm x 100 μm x 100 μm . Adotou-se para todas as direções da matriz condição de contorno periódica a fim de reproduzir um espaço amostral infinito. As velocidades de avanço das interfaces, G_1 e G_2 são independentes e foram mantidas constantes e iguais a um, ao longo de toda simulação.

O diâmetro médio dos grãos, \bar{d} (μm), medido na simulação, se refere a um diâmetro equivalente considerando que os núcleos tenham formato aproximadamente esférico.

Foram estudadas duas situações principais:

- Reação Simultânea onde ambas as fases produto nucleiam por taxa de nucleação constante. Temos neste caso duas taxas de nucleação, da fase 1 e da fase 2, I_1 e I_2 , respectivamente. Manteve-se para todos os casos I_1 constante e igual a 10 e variou-se apenas I_2 .
- Reação Simultânea onde a fase 1 nucleia por saturação de sítios e a fase 2, por taxa constante. Foram definidos o número de núcleos inicial da fase 1, N_1 , e a taxa de nucleação da fase 2, I_2 . Para essa situação, apenas variou-se a taxa de nucleação da fase 2 enquanto o número de núcleos iniciais da fase 1 foi mantido fixo e igual a 100 para todos os casos.

Todos os núcleos foram distribuídos uniformemente aleatórios na matriz. A taxa de nucleação e o número de núcleos de cada fase foram definidos por variáveis aleatórias de Poisson [11]. Assim, foram realizadas e tomadas a média de 50 simulações distintas para cada caso.

4 RESULTADOS

A seguir demonstra-se os casos em que uma fase matriz se transforma em duas fases produto simultaneamente. Na primeira situação apresentada tem-se que as fases 1 e 2 nuclearam por taxa constante e na segunda situação, a fase 1 nucleou por saturação de sítios e a fase 2, por taxa constante.

Para todos os casos comparou-se os resultados da simulação com as Equações (3-7). Mostra-se, portanto, as curvas de cinética, V_V versus Tempo, e a curva de S_V versus V_V , o chamado caminho microestrutural [13]. Nessas comparações os dados da simulação foram representados por pontos e os dados provenientes das equações analíticas, por linhas. Ressalta-se que foram realizadas 50 simulações para cada caso apresentado e então foi obtida a média dos seus valores cinéticos. Também se mostrou as microestruturas simuladas, onde a fase produto 1 é a mais clara e a fase produto 2, a mais escura.

4.1 Fase 1 e Fase 2 por taxa constante

Nesta seção são apresentados os resultados da primeira situação onde as fases 1 e 2 nuclearam por taxa constante, ou seja, um determinado número de núcleos surgiu ao longo da transformação. Logo, durante o crescimento de núcleos já existentes ocorria o surgimento de outros núcleos.

Na Figura 1 são mostrados os resultados cinéticos, onde a simulação computacional é comparada com a teoria analítica para uma relação entre as taxas igual a 1, $\frac{I_2}{I_1} = 1$.

Observa-se boa concordância entre os modelos. Por terem a mesma taxa de nucleação, ambas as fases findam a transformação com a mesma fração volumétrica, ou seja, $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$.

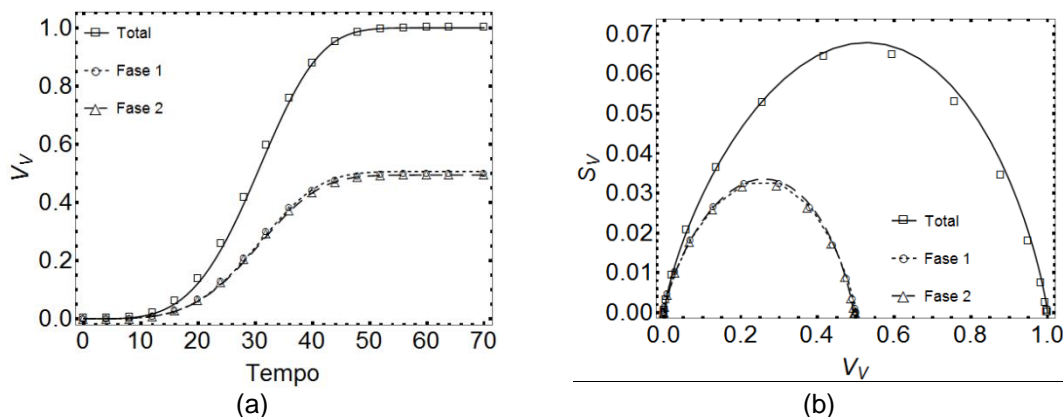


Figura 1. Resultados de transformação simultânea com $I_1 = 10$ e $I_2 = 10$. Nucleação da fase 1 e da fase 2 por taxa constante. (a) V_V versus tempo. (b) Caminho microestrutural.

Na Figura 2, tem-se a mesma representação, porém para uma relação entre as taxas, diferente do caso anterior. Desta vez, a relação é de $\frac{I_2}{I_1} = 20$, isso resulta em uma transformação dominada pela fase produto 2 que possui vinte vezes mais

núcleos por unidade de tempo que a fase produto 1. Tal domínio da fase 2 chega a 95% da matriz transformada.

Na Figura 3 são apresentadas as microestruturas simuladas obtidas ao fim da transformação para cada caso. Elas apresentam uma morfologia tal que os contornos de grão possuem uma certa curvatura devido à diferença de momento em que os núcleos surgiram. Essa morfologia é similar à relatada por Johnson e Mehl [1].

Na Figura 3a, as fases ocupam o mesmo volume da matriz, ao contrário da Figura 3b, onde é possível visualizar um grande predomínio da fase produto 2, em cinza escuro, em função justamente de uma maior taxa de nucleação.

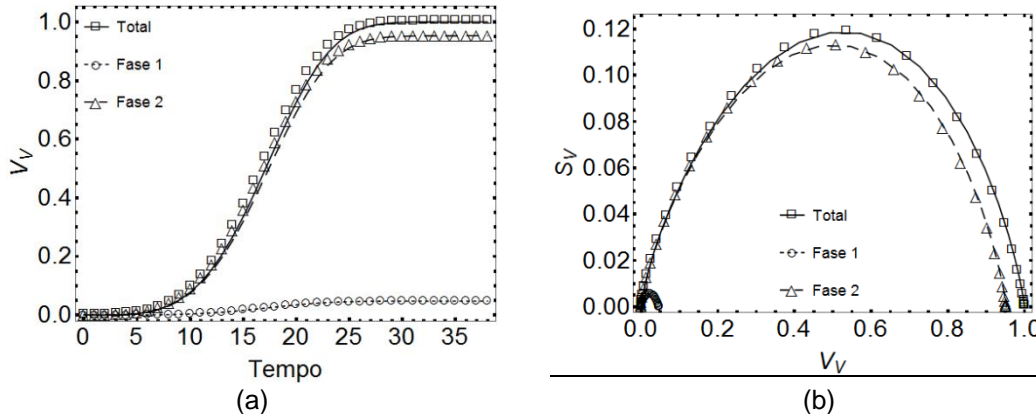


Figura 2. Resultados de transformação simultânea com $I_1 = 10$ e $I_2 = 200$. Nucleação da fase 1 e da fase 2 por taxa constante. (a) V_V versus tempo. (b) Caminho microestrutural.

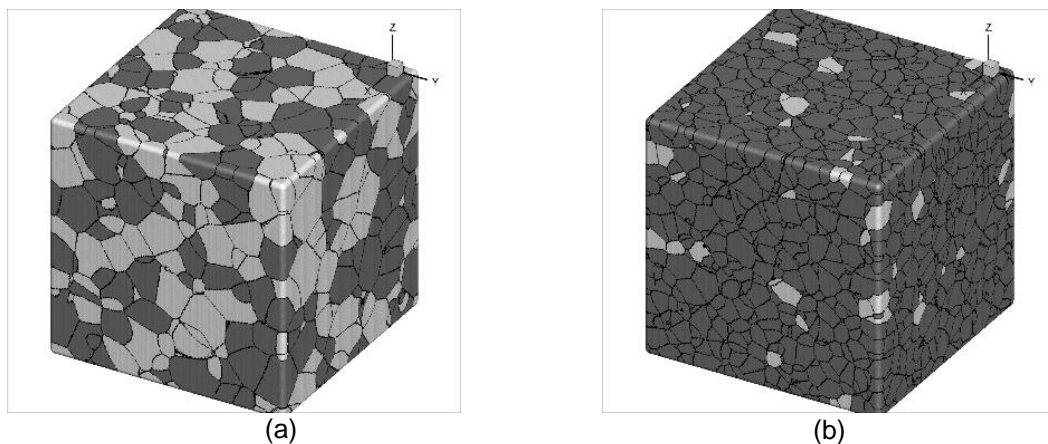


Figura 3. Representação em três dimensões da microestrutura totalmente transformada. Reação simultânea com: (a) $I_1 = I_2 = 10$ e (b) $I_1 = 10$; $I_2 = 200$.

4.2 Fase 1 por saturação de sítios e Fase 2 por taxa constante

Nesta situação, considerou-se que a fase produto 1 foi nucleada por saturação de sítios e a fase produto 2, por taxa constante. Logo, todos os núcleos da fase 1 foram saturados no início da transformação, em $t = 0$, diferentemente dos núcleos da fase 2 que surgem ao longo da transformação.

Para uma relação $\frac{I_2}{N_1} = 0,1$, a comparação entre o resultado do modelo computacional e o modelo analítico de Rios e Villa [4] é mostrada na Figura 4. Novamente, observa-se uma ótima concordância entre os modelos. As fases ao fim da transformação chegam a possuir praticamente a mesma fração volumétrica,

similar ao caso apresentado na Figura 1. Porém, no início da transformação, a fase produto 1 ocupa uma maior fração transformada, muito devido à presença de todos os seus núcleos já no tempo $t = 0$, diferentemente da segunda fase.

Aumentando-se a taxa de nucleação da fase 2 em relação ao caso anterior, tem-se o caso mostrado na Figura 5, onde $\frac{I_2}{N_1} = 2$. De maneira similar às situações descritas anteriormente, observa-se ótima concordância entre o modelo analítico e o modelo computacional. Vale destacar que nenhum ajuste de curva ou parâmetro ajustável foi utilizado.

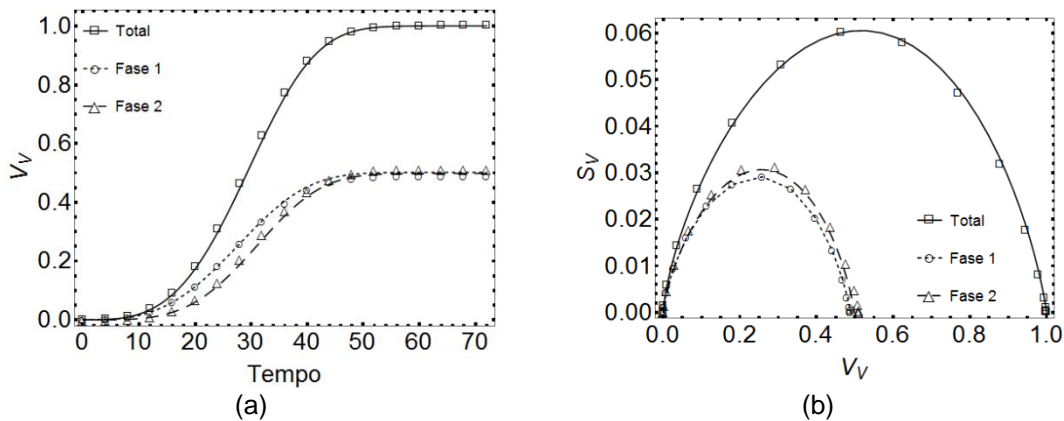


Figura 4. Resultados de transformação simultânea com $N_1 = 100$ e $I_2 = 10$. Nucleação da fase 1 por saturação de sítios e da fase 2 por taxa constante. (a) V_V versus tempo. (b) caminho microestrutural.

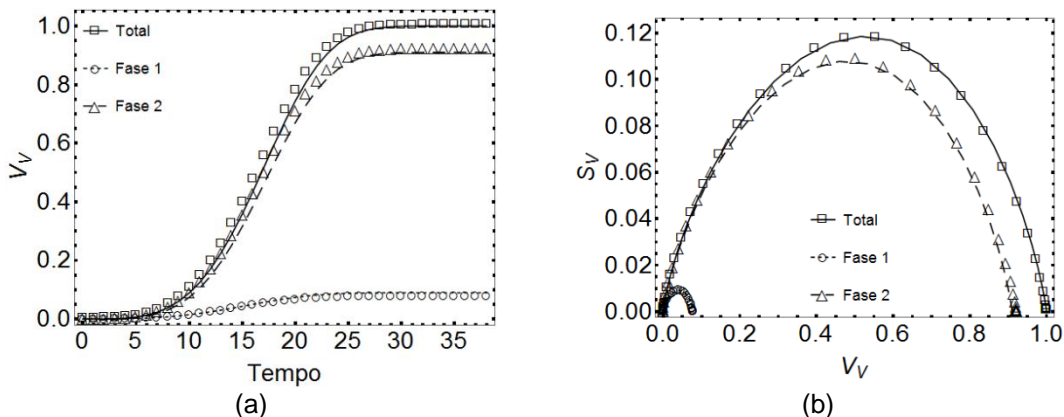


Figura 5. Resultados de transformação simultânea com $N_1 = 100$ e $I_2 = 200$. Nucleação da fase 1 por saturação de sítios e da fase 2 por taxa constante. (a) V_V versus tempo. (b) caminho microestrutural.

A Figura 6 traz a representação da microestrutura simulada dos dois casos apresentados neste tópico. É possível notar na Figura 6a a diferença do contorno de grão quando se compara a interface da Fase 1/Fase 1, Fase 2/Fase 2 e Fase 1/Fase 2.

As interfaces entre os grãos cinza claro (Fase 1/Fase 1) são planas, ou seja, uma linha reta em 2-d. Isso ocorre, pois a nucleação desta fase ocorreu por saturação de sítios. Por outro lado, a interface entre os grãos cinza escuro (Fase 2/Fase 2) são segmentos de hipérbole. Isso também foi observado anteriormente na Figura 3, onde os núcleos de ambas as fases surgiram a uma taxa constante ao longo do tempo, como a Fase 2 neste caso.

Como no presente estudo ocorre uma transformação simultânea de duas fases produto, tem-se também uma terceira interface, aquela que limita a região dos grãos da fase 1 com os grãos da fase 2. Essa interface também apresenta uma morfologia

com curvatura, característico de grãos nucleados sequencialmente ou a uma taxa ao longo do tempo.

Na Figura 6b, observa-se novamente o predomínio da fase 2, com alguns poucos grãos da fase 1. Isso faz com que praticamente não haja, neste caso, interface entre os grãos da fase 1.

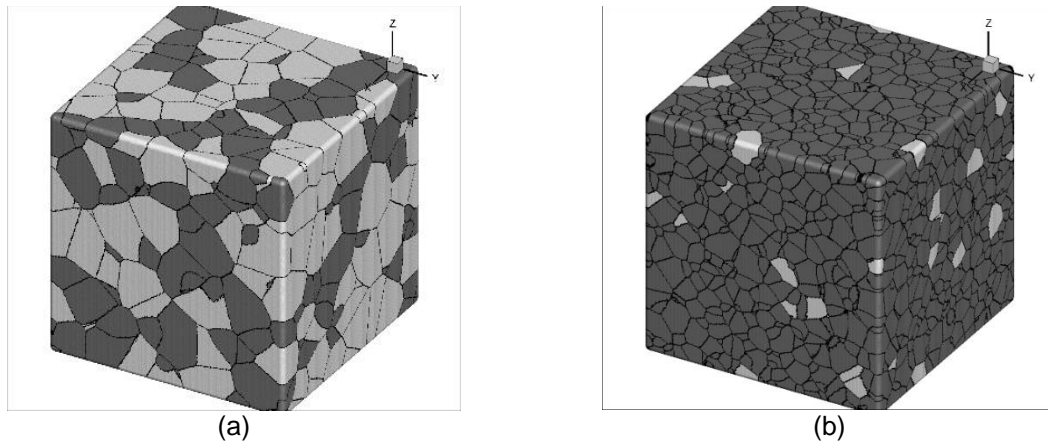


Figura 6. Representação em três dimensões da microestrutura totalmente transformada. Reação simultânea com: (a) $N_1 = 100$; $I_2 = 10$ e (b) $N_1 = 100$; $I_2 = 200$.

5 DISCUSSÃO

Diferenciar experimentalmente o tipo de nucleação que ocorreu em um determinado material pode se tornar uma árdua tarefa ao se utilizar modelos cinéticos, como fração volumétrica e o caminho microestrutural.

As Figuras 1 e 4 são muito semelhantes, até mesmo no que se refere à fração volumétrica final de cada fase. Dessa maneira, buscou-se outro método que seja possível diferenciar quando uma fase nucleia por saturação de sítios ou por taxa constante.

A Figura 7 apresenta o histograma da distribuição de volumes dos grãos de cada fase (frequência contra V/\bar{V} , onde \bar{V} é o volume médio dos grãos da matriz). As Figuras 7(a-c) se referem ao primeiro caso (Figuras 1 e 3a) onde as duas fases surgem por taxa de nucleação. A distribuição do tamanho de grão nesse caso claramente não é uma distribuição normal nos três histogramas, pois a maior parte dos núcleos são pequenos ao fim da transformação. Assim, os três histogramas possuem um pico na extremidade esquerda.

Já as Figuras 7(d-f) mostram a situação em que a fase 1 nucleia por saturação de sítios e a fase 2 por taxa constante (condição apresentada nas Figuras 4 e 6a). O histograma da fase 1 apresenta uma distribuição próxima a uma distribuição normal diferentemente da fase 2. Logo, a forma de nucleação, seja por saturação de sítios, seja por taxa constante, influencia no formato do histograma.

A distribuição da matriz total (Figura 7d) acaba se assemelhando ao formato da distribuição da fase 2 (Figura 7f) por esta possuir um maior número de grãos ao fim da transformação, cerca de 282 grãos da fase 2 contra 100 grãos da fase 1.

A Figura 8 mostra o resultado do diâmetro médio dos grãos de cada fase (\bar{d}), medidos em micrometros, ao fim da simulação para diferentes casos simulados. Na Figura 8a, onde as duas fases surgiram por taxa constante, observa-se que os grãos de ambas as fases possuem o mesmo diâmetro médio mesmo variando a taxa de

nucleação da fase 2 e, assim, aumentando a relação $\frac{I_2}{I_1}$. Ressalta-se que foram realizadas 50 simulações pelo processo de ponto de Poisson [11].

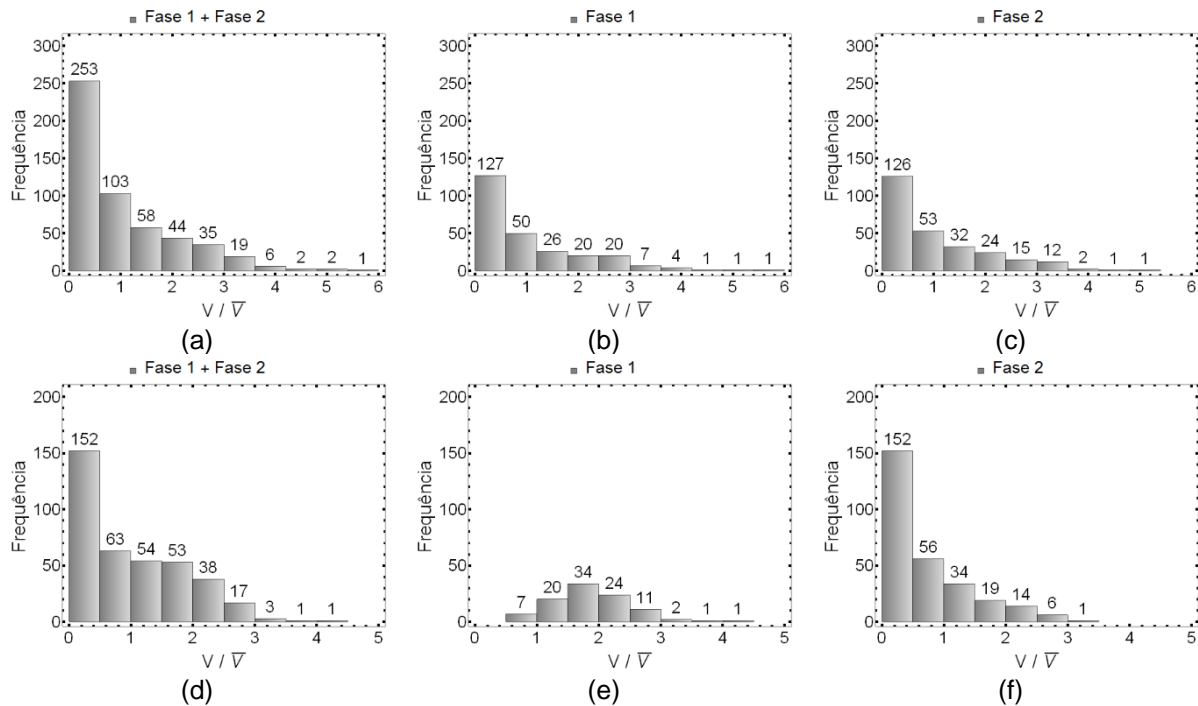


Figura 7. Distribuição do tamanho de grão. (a), (b) e (c) se referem a condição simulada e apresentada nas Figuras 1 e 3a: nucleação da fase 1 e da fase 2 por taxa constante. (d), (e) e (f) se referem a condição simulada e apresentada nas Figuras 4 e 6a: nucleação da fase 1 por saturação de sítios e da fase 2 por taxa constante.

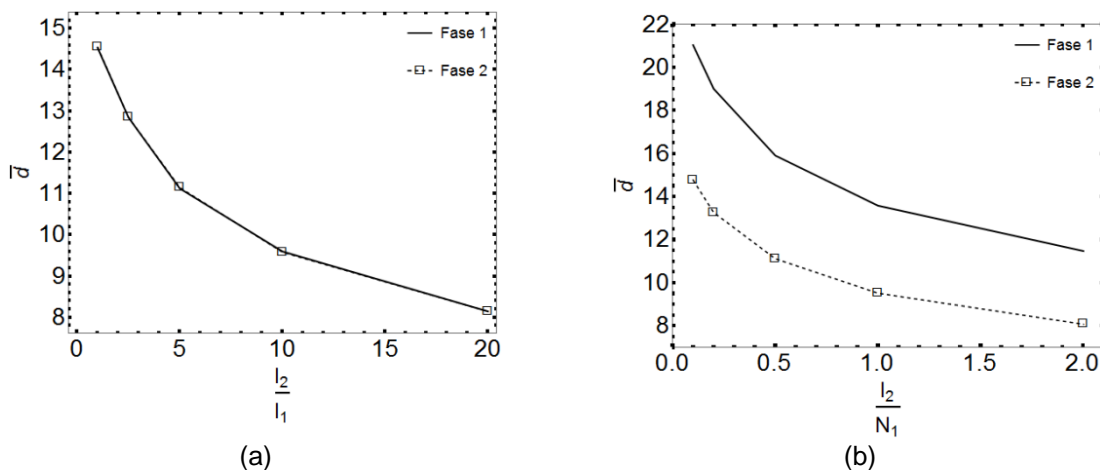


Figura 8. Diâmetro médio (em µm) dos grãos de cada fase para diferentes relações de número de núcleos e taxa de nucleação. (a) nucleação da fase 1 e da fase 2 por taxa constante. (b) nucleação da fase 1 por saturação de sítios e da fase 2 por taxa constante.

Assim sendo, os resultados sugerem que devido à aleatoriedade do posicionamento dos núcleos na matriz, à velocidade de crescimento constante e ao modo de nucleação, taxa constante, ser igual para ambas as fases, os tamanhos médios dos grãos das diferentes fases também são iguais.

Já na Figura 8b, onde a fase 1 nucleou por saturação de sítios e a fase 2 por taxa constante, o diâmetro médio dos grãos da fase 1 é diferente do diâmetro médio da fase 2, mesmo variando a sua taxa de nucleação. Para uma relação $\frac{I_2}{N_1} = 0,1$ que

resultou em uma fração volumétrica aproximadamente igual a 0,5 para ambas as fases, não se tem o mesmo diâmetro médio para os grãos das duas fases.

Neste caso, mesmo as fases estando aleatoriamente distribuídas e com velocidade de crescimento constante, o modo de nucleação foi diferente. A fase 1 nucleou por saturação de sítios e a fase 2 por taxa constante. Os grãos da fase 1 possuem maior tamanho médio por todos estarem crescendo desde o começo da transformação. Já os grãos da fase 2 foram surgindo ao longo do tempo, resultando em muitos grãos pequenos e poucos grãos grandes, como pode ser visualizado no histograma da Figura 7.

6 CONCLUSÃO

Fez-se uso de simulação computacional para estudar a influência de reações simultâneas que nucleiam por taxa constante na cinética, na microestrutura e interface e na distribuição do tamanho de grão em uma região tridimensional.

Em uma situação estudada, ambas as fases nuclearam por taxa constante. Em outra, apenas a fase 2 surgiu a uma taxa constante ao longo do tempo enquanto a fase 1 nucleou por saturação de sítios. A partir dos resultados obtidos conclui-se que:

- Todas as simulações computacionais se mostraram em concordância com o modelo analítico de Rios e Villa [4], representado pelas Equações (3-7). A partir das simulações, microestruturas tridimensionais puderam ser obtidas de modo a extrair outros parâmetros não mensuráveis pelas equações.
- Quando ambas as fases nucleiam por taxa constante e possuem a mesma taxa de nucleação, a fração volumétrica final das fases são iguais. Por outro lado, quando se tem fases nucleadas por saturação de sítios e taxa constante transformando simultaneamente, a relação entre a taxa de nucleação e número de núcleos deve ser $\frac{I_2}{N_1} = 0,1$ para que essas fases produto alcancem a mesma fração volumétrica ao fim da transformação,
- Assim como observado por Frost [10] em transformações reais, nas microestruturas simuladas também observou-se tanto curvaturas como segmentos de linha reta nas interfaces. Os grãos nucleados por taxa constante formam, ao se encontrar, contornos com certa curvatura. Já os grãos nucleados por saturação de sítios formam interfaces em linha reta. As interfaces entre grãos que nucleiam em tempos ou momentos diferentes também apresentam certa curvatura.
- A distribuição de frequência de volumes dos grãos das fases nucleadas por taxa constante possui pico na extremidade esquerda devido à alta quantidade de núcleos que surgem a partir da metade da transformação. Logo, a distribuição não é normal. Já quando a fase nucleou por saturação de sítios, obteve-se uma distribuição aproximadamente normal no histograma de frequência de volumes da fase 1. A fase 2, nucleada por taxa constante, manteve o perfil de histograma com pico na extremidade esquerda. Quando se analisou todos os grãos, a fase nucleada por taxa constante foi predominante na distribuição de volumes.
- Ao variar a relação entre taxas, $\frac{I_2}{I_1}$, a fase 1 e a fase 2 continuaram apresentando tamanho médio dos grãos iguais. Isso ocorreu devido à aleatoriedade do posicionamento dos núcleos na matriz, à velocidade de

crescimento constante e ao modo de nucleação, taxa constante, ser igual para ambas as fases.

- Para a situação em que a fase 1 nucleou por saturação de sítios, o tamanho médio dos grãos foi distinto para cada fase. Neste caso, mesmo as fases estando aleatoriamente distribuídas e com velocidade de crescimento constante, o modo de nucleação foi diferente.
- Em suma, observa-se que parâmetros microestruturais como tamanho médio de grãos e morfologia das interfaces podem auxiliar o pesquisador a identificar o tipo de nucleação, seja por saturação de sítios seja por taxa constante.

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] Johnson WA, Mehl RF. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans Metall Soc AIME* 1939;135:416–41.
- [2] Kolmogorov AN. On the statistical theory of metal crystallization. *Isvetiia Acad Nauk SSSR-Seriia Mat* 1937;1:335–59.
- [3] Avrami M. Kinetics of phase change. I: General theory. *J Chem Phys* 1939;7:1103–12. doi:10.1063/1.1750380.
- [4] Rios PR, Villa E. Simultaneous and sequential transformations. *Acta Mater* 2011;59:1632–43. doi:10.1016/j.actamat.2010.11.030.
- [5] Vandermeer RA, Jensen DJ. Modeling microstructural evolution of multiple texture components during recrystallization. *Acta Metall Mater* 1994;42:2427–36. doi:10.1016/0956-7151(94)90321-2.
- [6] Vandermeer RA, Jensen DJ. Quantifying recrystallization nucleation and growth kinetics of cold-worked copper by microstructural analysis. *Metall Mater Trans A* 1995;26:2227–35. doi:10.1007/BF02671238.
- [7] Jones SJ, Bhadeshia HKDH. Kinetics of the simultaneous decomposition of austenite into several transformation products. vol. 45. 1997.
- [8] Jones SJ, Bhadeshia HKDH. Competitive Formation of Inter-and Intragranularly Nucleated Ferrite. vol. 28. 1997.
- [9] Magnusson H, Jensen DJ, Hutchinson B. Growth rates for different texture components during recrystallization of IF steel. 2001.
- [10] Frost HJ. Microstructural evolution in thin films. *Mater Charact* 1994;32:257–73. doi:10.1016/1044-5803(94)90102-3.
- [11] Alves ALM, Assis WLS, Rios PR. Computer simulation of sequential transformations. *Acta Mater* 2017;126:451–68. doi:10.1016/j.actamat.2016.12.068.
- [12] Fonseca GD, Siqueira FS, Alves ALM, Assis WLS, Rios PR. Microstructural descriptors to characterize computer simulated microstructures generated by nucleation on a Kelvin polyhedra network. *J Mater Res Technol* 2018;7:337–41. doi:10.1016/j.jmrt.2018.05.001.
- [13] Vandermeer RA, Masumura RA, Rath BB. Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations. *Acta Metall Mater* 1991;39:383–9. doi:10.1016/0956-7151(91)90317-T.