

EFFECTOS DE LA DIFUSION EN BORDE DE GRANO EN EL CRECIMIENTO ANORMAL DE GRANO

Carlos A. Cattaneo^{a,b} and Silvia P. Silveti^b

^a*Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano Sur 1912; G4200ABT Santiago del Estero, Argentina, cacatta@unse.edu.ar <http://faa.unse.edu.ar>*

^b*Facultad de Matemáticas Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina, silveti@famaf.unc.edu.ar <http://www.famaf.unc.edu.ar>*

Keywords: Crecimiento anormal de grano, difusión, autómatas celulares.

Abstract. Durante los tratamientos isotérmicos de los materiales se observa que, a veces, algunos granos de la microestructura crecen exageradamente respecto del resto. Este fenómeno se denomina crecimiento anormal de grano. Los trabajos experimentales, analíticos y de simulación numérica publicados muestran que el crecimiento anormal de grano está relacionado con la textura del material, la movilidad de borde de grano, la distribución y la disolución de partículas de segunda fase. Pero es casi nula la bibliografía que analice si existe alguna correspondencia entre el crecimiento anormal de grano y la difusión en borde de grano. En este trabajo se analiza el efecto que tiene la difusión en borde de grano en el crecimiento anormal de grano, para ello se desarrolló un algoritmo basado en un autómata celular, el cual tiene en cuenta el calor de difusión en borde de grano y la temperatura a la que se realiza el ensayo; además, el algoritmo permite trabajar con sistemas monofásicos y bifásicos, variando el tamaño, la fracción de las partículas de segunda fase y la movilidad de borde de grano. Los resultados muestran que la difusión en el borde de grano juega un papel importante en el crecimiento anormal de grano, ya que permite determinar para cada material -el cual está caracterizado por la energía de borde de grano, el calor de difusión en borde de grano y la temperatura de fusión- la temperatura del ensayo a partir de la cual se observa crecimiento anormal tanto para sistemas monofásicos como bifásicos.

1 INTRODUCCION

Muchas de las propiedades de los materiales, dependen del tamaño de grano de la microestructura del material, por ejemplo materiales estructurales a bajas temperaturas requieren que la microestructura posea un tamaño de grano pequeño, mientras que para materiales resistentes al *creep* a altas temperatura es necesaria una distribución de tamaño de grano grande. Por eso, se hace esencial conocer los mecanismos de crecimiento de grano.

El crecimiento de grano es un proceso que tiene lugar durante el recocido de materiales policristalinos, donde algunos granos crecen a expensas de otros que desaparecen. Existen dos tipos de crecimiento de grano: el crecimiento normal y el crecimiento anormal.

En el crecimiento normal se advierte que los granos aumentan su tamaño uniformemente en el tiempo, de tal forma que se observa una distribución uniforme de tamaño de grano. En el crecimiento anormal de grano, unos pocos granos de la microestructura (granos anormales) crecen muchos más rápido que el resto de granos de la microestructura y, al final, consumen la matriz de granos finos alrededor de ellos.

Existen cuatro formas conocidas de inhibir el crecimiento normal de grano. Ellas son debidas a los átomos soluto (Higgins, 1974), espesor de la muestra (Mullins, 1958), orientación preferencial (Beck y Sperry, 1949) y partículas de segunda fase (Hassner, 1978). En todas, puede ocurrir crecimiento anormal cuando se suma algún otro factor que promueva el movimiento de algunos pocos contornos en relación a los demás.

La influencia de átomos soluto se puede entender por el análisis de la distribución de soluto próxima al borde en migración. Cuando un contorno se encuentra en una posición estacionaria, la disposición de átomos soluto es simétrica a la línea central del borde de grano, pero cuando éste se mueve, la distribución se vuelve asimétrica. El número de átomos soluto asimétricamente dispuestos es un factor que determina la restricción al movimiento de los bordes de grano. Cuanto más asimétrica es la distribución, mayor es el efecto restrictivo. Tal comportamiento es denominado de “baja velocidad”, y es típico del crecimiento de grano.

En muestras de espesor reducido, el crecimiento de grano ocurre hasta el instante en que el tamaño de grano alcanza el espesor de la muestra. En esta situación, el equilibrio energético entre el borde de grano y la superficie libre produce un surco térmico (*groove*). De esta forma, el borde de grano queda prácticamente inmóvil, ya que la posibilidad de movimiento de éste llevaría a una condición de mayor energía.

Otra forma de inhibición del crecimiento normal de granos se debe a una orientación preferencial (textura cristalográfica) poco pronunciada. En este caso, los contornos entre los diversos granos poseen, en la mayor parte, una movilidad y una energía libre de superficie relativamente bajas, porque las diferencias de orientación entre los granos son relativamente pequeñas. Tales valores tornan extremadamente lenta la migración de los bordes de grano, provocando la inhibición del crecimiento normal del mismo (Zhengfung, 1985).

La inhibición por partícula de segunda fase se presupone que cuando una partícula se encuentra en el borde de grano, se debe crear una determinada área para que el borde de grano continúe migrando, y tal etapa involucra un consumo de energía. El efecto de la

partícula de segunda fase es el de provocar una variación en la forma del borde a medida que éste avanza sobre la partícula de segunda fase.

En una estructura de granos impedidos de crecer por partículas de segunda fase, es posible obtener el crecimiento anormal de grano a través del crecimiento competitivo o la disolución de las partículas de segunda fase en determinadas regiones, de tal forma que los bordes de grano allí localizados sean capaces de migrar, mientras que los demás permanecen inhibidos de crecer (Hassner, 1978).

Existen gran cantidad de trabajos realizados en el área de estudio del crecimiento anormal de grano, pero no se entienden con exactitud los mecanismos por los que aparecen y se desarrollan granos anormales a partir de una distribución de tamaño de grano uniforme. El rápido crecimiento de grano dificulta obtener todos los detalles microestructurales durante las observaciones experimentales. Por lo tanto, las simulaciones computacionales se presentan como una posible herramienta para el estudio de los mecanismos de crecimiento.

El método de Monte Carlo ha sido utilizado por diferentes autores para simular el crecimiento anormal de grano. En 1999, Rollet *et al.* lo emplean teniendo en cuenta la anisotropía, la energía y la movilidad del borde de grano. En 2004, Ivasishin *et al.* lo usan para modelar el crecimiento anormal de grano en materiales texturados. En 2007 Cattaneo y Silveti lo aplican en sistemas bifásicos con disolución de partículas de segunda fase y en 2008 proponen un modelo híbrido basado en autómatas celulares y Monte Carlo para simular el crecimiento normal de grano considerando la difusión de borde de grano.

En el presente trabajo se aplica este modelo para simular el crecimiento anormal de grano, tanto para sistemas monofásicos como bifásicos, en los cuales se tiene en cuenta la temperatura a la que se realiza el ensayo, la energía de borde de grano, la movilidad de borde de grano, la fracción de partícula de segunda fase y la disolución de partículas de segunda fase.

2 METODO

Al modelo híbrido planteado por Cattaneo y Silveti en 2008, se le realizan las modificaciones necesarias para simular el crecimiento anormal de grano propuestas en 2007 por Cattaneo y Silveti, las cuales son:

- Se agrega en la matriz de la microestructura un grano con una orientación distinta a las usadas para el crecimiento normal de grano, orientación que va a poseer las condiciones para el crecimiento anormal.
- Se consideran los factores de movilidad de borde de grano $P(hkl-h'k'l')$, con el fin de asignar diferentes movilidades a los distintos tipos de bordes de grano. Indica la probabilidad de que un microcristal (sitio de red) pase de orientación hkl a la orientación $h'k'l'$.

Con lo cual la probabilidad de transición p de un microcristal (sitio de red) a otro queda (ecuación 1):

$$p = \begin{cases} P_{(hkl-h'k'l')} \frac{\exp(-Q/k_B T)}{\exp(-Q/k_B T_f)} * \exp(-\Delta U / k_B T) & \text{si } \Delta U > 0 \\ P_{(hkl-h'k'l')} \frac{\exp(-Q/k_B T)}{\exp(-Q/k_B T_f)} * 1 & \text{si } \Delta U \leq 0 \end{cases} \quad (1)$$

Donde: ΔU es la variación de la energía debida a la modificación del borde de grano producido por un microensayo de un microcristal, la cual es directamente proporcional a la energía de borde de grano (γ), Q es la energía de activación para la difusión de borde de grano, T_f la temperatura de cambio de fase del sistema y T la temperatura a la que se realiza el ensayo.

La probabilidad p de transición, tiene en cuenta la energía de borde de grano, la difusión de borde grano, la temperatura de cambio de fase del sistema y la movilidad de borde de grano.

3 RESULTADOS

Para realizar las simulaciones se utiliza aluminio como sistema bajo estudio, con lo cual los parámetros utilizados son $\gamma = 0,6 \text{ J/m}^2$, $Q = 15 \text{ kcal/mol}$, $T_f = 933^\circ\text{K}$. La matriz de simulación tiene un tamaño de 300×300 , con 100 orientaciones para granos de crecimiento normal, otra orientación distinta para el grano de crecimiento anormal y una última orientación, diferente a las anteriores, para las partículas de segunda fase. Se asume que cada sitio de matriz representa un tamaño de $2 \mu\text{m}$ de lado.

Las temperaturas usadas para las simulaciones son: 573°K , 673°K , 773°K y 873°K .

Se utiliza la siguiente convención para los factores de movilidad $P(hkl-h'k'l')$,

- $P(n-a)$ probabilidad de que un microcristal pase de un grano normal a un grano anormal
- $P(a-n)$ probabilidad de que un microcristal pase de un grano anormal a un grano normal
- $P(s-n)$ probabilidad de que un microcristal pase de una partícula de segunda fase a un grano normal
- $P(s-a)$ probabilidad de que un microcristal pase de una partícula de segunda fase a un grano anormal

Para todas las simulaciones se considera que: a) las partículas de segunda fase no pueden crecer, pero sí disolverse $P(s-n)$ y $P(s-a)$, y b) la probabilidad de que un microcristal pase de un grano normal a un grano anormal es igual a 1 ($P(n-a) = 1$).

Primero se simula en un sistema monofásico; en la [figura 1](#) se muestra la evolución del porcentaje de grano anormal con $P(a-n) = 0$, para todas las temperaturas analizadas. Como se puede observar la evolución del grano anormal depende fuertemente de la temperatura del ensayo, lo cual está relacionado con la difusión en el borde de grano. Para temperaturas mayores a 673°K el desarrollo del grano anormal es total, mientras que para 573°K el desarrollo del grano anormal es muy pequeño.

En la [figura 2](#) se muestra cómo evoluciona el tamaño del grano anormal y el tamaño de grano normal a la temperatura de 573°K . Como puede observarse, el tamaño del grano anormal ha cuadruplicado al del grano normal, a un tiempo de 30000 lazos, lo que está indicando que el mismo se está desarrollando a expensas de los granos normales.

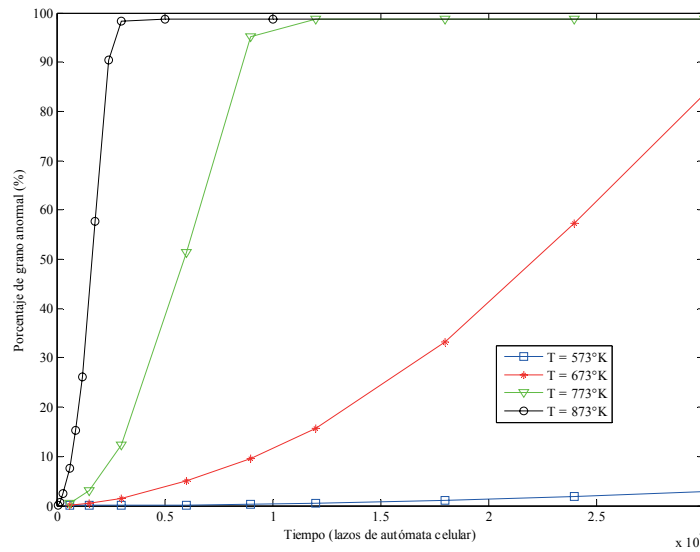


Figura 1. Desarrollo del grano anormal a distintas temperaturas para aluminio monofásico y $P(a-n) = 0$

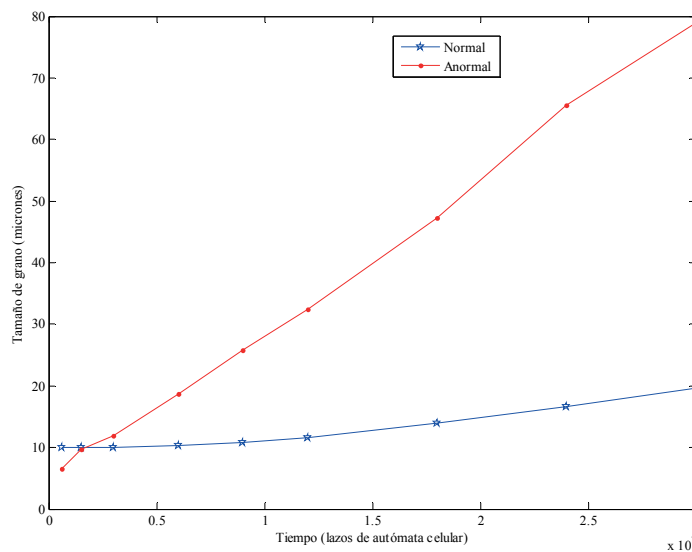


Figura 2 Crecimiento de grano para el aluminio monofásico a 573°K y $P(a-n) = 0$

A medida que aumenta la probabilidad de que un microcristal pase de un grano anormal a un grano normal, se observa que el desarrollo del grano anormal se hace más lento, llegando en algunos casos a no desarrollarse como se muestra en el caso de $P(a-n) = 0.8$ (figura 3), donde para temperaturas menores a 773°K el grano anormal desaparece totalmente.

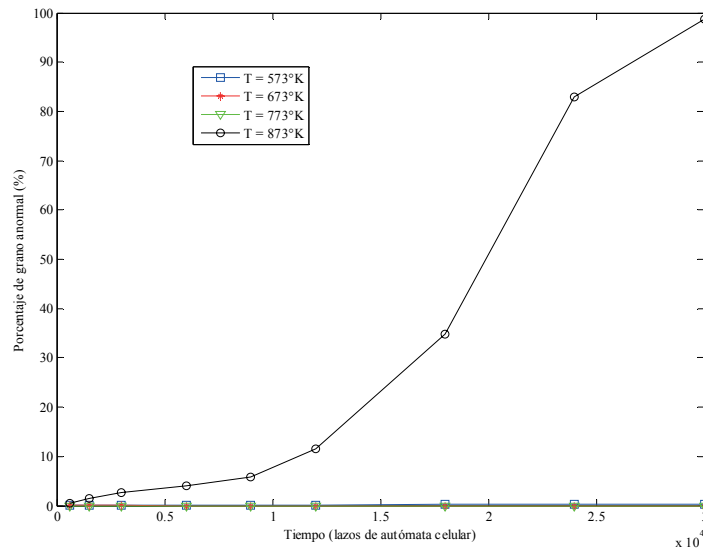


Figura 3. Desarrollo del grano anormal a distintas temperaturas para aluminio monofásico y $P(a-n) = 0.8$

Para analizar como influye la disolución de partículas de segunda fase en el desarrollo del grano anormal, se analizan sistemas bifásicos con 1%, 2% y 4% de partículas de segunda fase todos con tamaño de partícula de 2 micrones de lado.

Primero se analiza que ocurre si no hay disolución de partículas de segunda fase, es decir si $P(s-n) = 0$ y $P(s-a) = 0$, para el caso extremo en que $P(a-n) = 0$.

En la figura 4 se muestran los resultados para un sistema con 1% de partículas de segunda fase. Se observa que el porcentaje de grano anormal alcanza un pequeño valor que se mantiene estable.

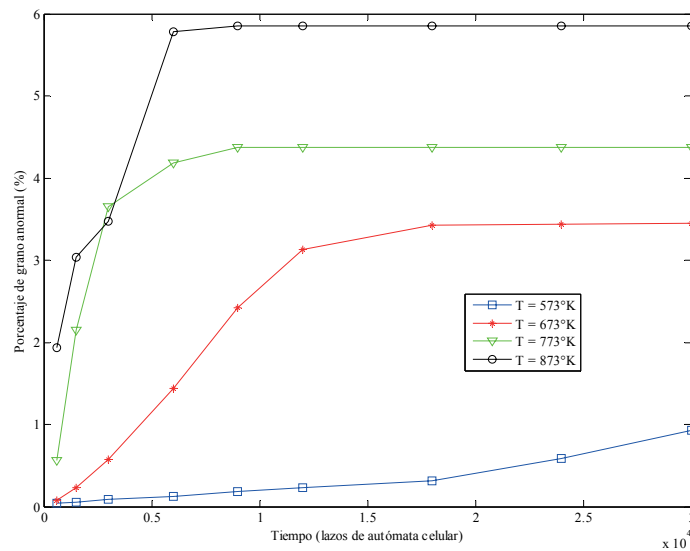


Figura 4. Desarrollo del grano anormal a distintas temperaturas para el sistema bifásico de 1% de partículas de segunda fase, sin disolución de partículas de segunda fase y $P(a-n) = 0$

Puede notarse que el aumento de la disolución de partículas de segunda fase en el borde de grano anormal, produce un mayor desarrollo del grano anormal como se registra en la [figura 5](#) para un sistema con 4% de partículas de segunda fase a 673°K, con $P(s-n) = 0$ y $P(a-n) = 0$.

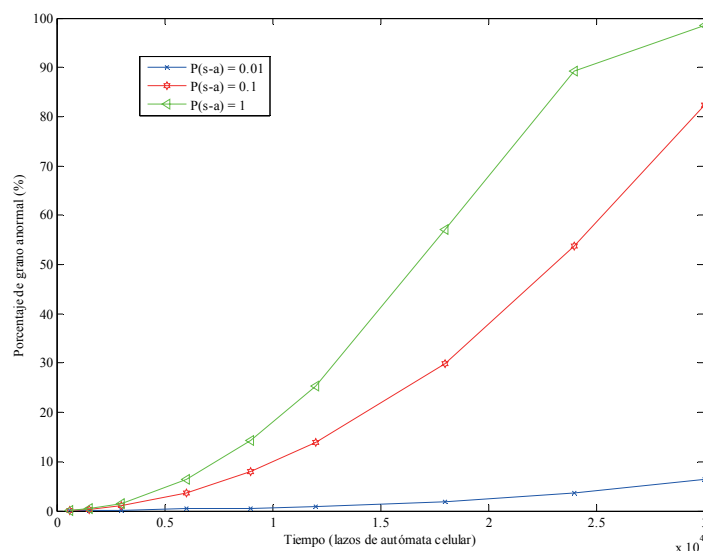


Figura 5. Efecto del aumento de disolución de partículas de segunda fase en el borde de grano anormal, para el sistema bifásico de 4% de partículas de segunda fase, a 673°K, con $P(s-n) = 0$ y $P(a-n) = 0$

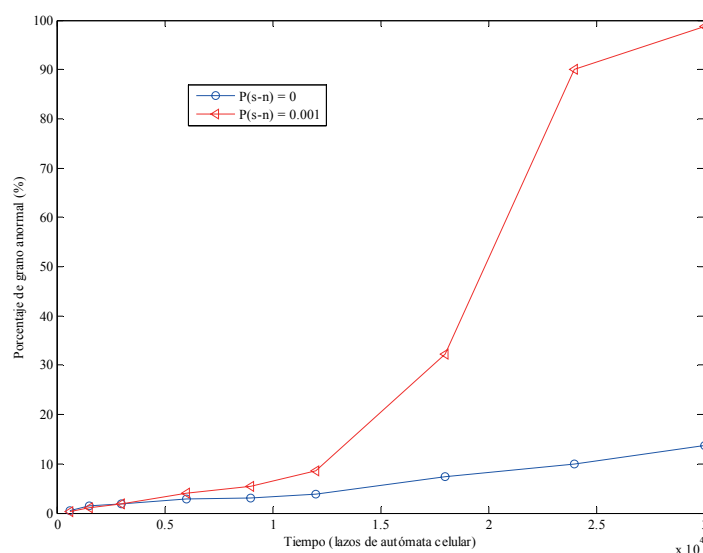


Figura 6. Efecto de la disolución de partículas de segunda fase en ambos bordes de grano, para sistema bifásico de 2% de partículas de segunda fase, a 773°K, con $P(s-a) = 0.001$ y $P(a-n) = 0$

En la [figura 6](#) se analiza un sistema con 2% de partículas de segunda fase a 773°K con, $P(a-n) = 0$ y $P(s-a) = 0.001$, para los casos de $P(s-n) = 0$ (curva en azul) y $P(s-n) = 0.001$ (curva en rojo). Al considerar sistemas que poseen igual probabilidad de disolución de partículas de segunda fase, ubicadas tanto en el borde de grano anormal como en el

normal, se nota que hay un mayor desarrollo del grano anormal respecto del sistema con disolución solamente en el borde anormal.

Si consideramos además que la probabilidad de que un microcristal pase de un grano anormal a un grano normal ($P(a-n)$) sea distinta de cero, se observa que a medida que ésta aumenta el desarrollo del grano anormal disminuye, hasta llegar al extremo en que el grano anormal desaparece totalmente. En la [figura 7](#) se grafican los resultados para un sistema de 2% de partículas de segunda fase a 673°K con $P(s-a) = 0.01$, la curva en azul corresponde a la situación de $P(s-n) = 0$ y $P(a-n) = 0$. La curva en rojo pertenece a $P(s-n) = 0.01$ y $P(a-n) = 0$ expresando el mismo efecto mostrado en la [figura 6](#), el cual corresponde al mayor desarrollo del grano anormal. Por último la curva verde muestra los resultados para $P(s-n) = 0.01$ y $P(a-n) = 0.5$, indicando que un aumento en $P(a-n)$ va en detrimento del desarrollo del grano anormal.

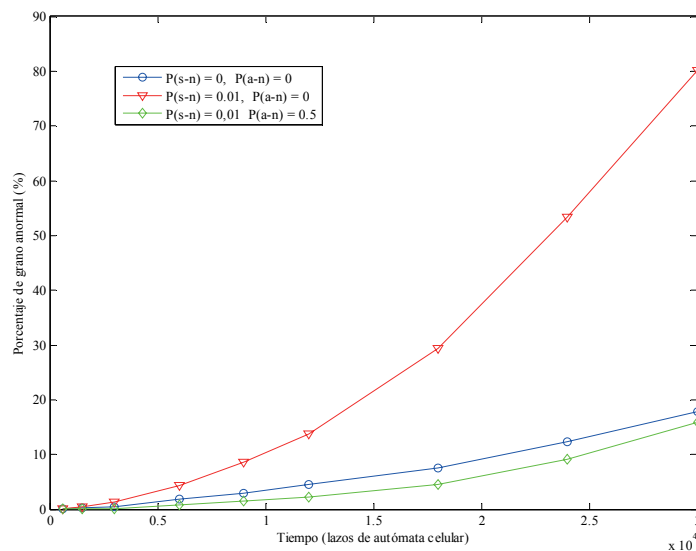


Figura 7. Desarrollo del grano anormal para el sistema bifásico de 2% de partículas de segunda fase, a 673°K, con $P(s-a) = 0.01$

4 CONCLUSIONES

De la combinación de los algoritmos propuestos por Cattaneo y Silveti en 2007 y 2008, se construyó un sistema que permite simular el crecimiento anormal de grano, teniendo en cuenta la energía de borde de grano, la difusión de borde de grano, la movilidad de borde de grano y la disolución de partículas de segunda fase. Todas estas variables forman parte de la probabilidad de transición de un microensayo (ecuación 1).

El efecto de la difusión en borde de grano se observa en que al incrementar la temperatura se aumenta el desarrollo del grano anormal, manteniendo el resto de las condiciones de simulación constantes, como se observa en las figuras 1, 3 y 4.

En los sistemas bifásicos, al considerar solamente la probabilidad de disolución de partículas de segunda fase en el borde de grano anormal, se observa un mayor desarrollo del grano anormal a medida que ésta aumenta, como se observa en la [figura 5](#).

Para el desarrollo del grano anormal, es más favorable considerar una probabilidad de disolución de partículas de segunda fase constante en todo el sistema ($P(s-a) = P(s-n)$),

que considerar solamente disolución en el borde de grano anormal, como se muestra en las figuras 6 y 7.

El aumento de la probabilidad de que un microcristal pase de un grano anormal a un grano normal ($P(a-n)$) va en detrimento del desarrollo del grano anormal (figuras 1, 3 y 7).

REFERENCIAS

- Beck, P. A. and Sperry, P. R., Effect of recrystallization texture on grain growth, *Metals Transactions*, 185:240-241. 1949.
- Cattaneo, C. y Silvetti S., Análisis de crecimiento anormal de grano aplicando el método de Monte Carlo, *Mecánica Computacional*, XXVI: 1597-1610. 2007.
- Cattaneo, C. y Silvetti, S., Modelo híbrido para el crecimiento de grano aplicando autómatas celulares y método de Monte Carlo, *Mecánica Computacional*, XXVII: 2385-2395. 2008.
- Higgins, G. T., Grain boundary migration and grain growth, *Metal Science*, 8:143-150. 1974.
- Hassner, F., *Secondary recrystallization*, Stuttgart, Dr. Riedeler Verlag GmbH, 97-109. 1978.
- Ivasishin, O. M., Schevchenko, S. V., Semiatin, S. L., Modeling of abnormal grain growth in textured materials, *Scripta Materialia*, 50:1241-1245. 2004.
- Mullins W. W., The effect of thermal grooving on grain boundary motion, *Acta Metallurgica*, 6:414-427. 1958.
- Rollett, A. D., Srolovitz, D. J., Anderson, M. P., Simulation and theory of abnormal grain growth-anisotropic grain boundary energies and mobilities, *Acta Metallurgica*, 37:1227-1240. 1989.
- Zhengfung, Q., The abnormal growth of austenite grain, *Transactions of the Metals Heat Treatment*, 2: 9-19. 1985.