

Capítulo 12

Simulação computacional de recristalização de grãos

Maurilio Pereira Gomes

Luis Augusto Mendes dos Reis

Evandro Giuseppe Betini

Resumo: Um modelo de Monte Carlo bidimensional foi desenvolvido para simular a recristalização de grãos na presença de uma partícula circular imóvel para diferentes valores de energias armazenadas. Para energias armazenadas maiores que um valor crítico ($H/J = 2,01$) a propagação da recristalização pôde facilmente transpor a partícula imóvel, levando a uma densidade aleatória dos grãos e a uma influência insignificante da partícula imóvel na cinética da recristalização. Para energias armazenadas mais baixas ($H/J = 0,1$), a partícula imóvel limita a propagação da recristalização, levando à uma recristalização incompleta.

Palavras-chave: Simulação; Recristalização de grãos; Método Monte Carlo

1. INTRODUÇÃO

Existe uma grande influência das partículas de segunda fase na recristalização primária. Uma característica interessante da recristalização na presença de partículas secundárias é que, em alguns casos, estas partículas retardam a recristalização, enquanto em outros, a cinética da recristalização é acelerada. As razões para esta variação estão associadas ao retardo na migração de partículas presentes nos contornos de grãos e a nucleação estimulada por partículas de grãos já recristalizados [1].

A aplicação do método de Monte Carlo baseado em cadeias de Markov: Metropolis-Hastings em simulação microestrutural tem tido bastante adesão principalmente por meio da extensão do modelo de rede de Ising, utilizado na modelagem de sistemas de rotação magnética, ao modelo de Potts com múltiplos estados cinéticos [2].

O modelo original de Ising está na forma de um modelo de malha de rotação 0/1, onde a energia interna de um sistema magnético é calculada como a soma das energias de interação de pares contínuos que estão conectadas aos nós de uma malha regular. O modelo de Potts se desvia do modelo de Ising por generalizar a rotação e usando um algoritmo Hamiltoniano diferente. Ele substitui a variável de rotação booleana, em que apenas dois estados são admissíveis (girar para cima ou girar para baixo) por uma variável mais abrangente, onde é possível que esta assuma qualquer um dos estados de rotação presente dentre vários espectros discretos, e leva em conta apenas a interação entre vizinhos diferentes. A introdução deste espectro mais amplo de diferentes rotações possíveis permite representar domínios discretamente por regiões de estado idêntico (rotação). Por exemplo, na simulação microestrutural, esses domínios podem ser interpretados como áreas de matéria cristalina de orientação semelhante. Cada uma dessas variáveis de orientação de rotação pode ser equipada com um conjunto de valores de variáveis de estado característicos, quantificando a energia da rede, a densidade de deslocamento, o fator de Taylor ou qualquer outra propriedade constitutiva de interesse dependente da orientação. As regiões da rede que consistem em domínios com rotação ou estado idênticos estão nesses modelos traduzidos como grãos de cristais. Os valores da variável de estado inserem o modelo hamiltoniano de Potts [3].

A propriedade mais característica do operador de energia, quando usada para modelos de expansão, é que esta define a energia de interação entre nós com rotações iguais como zero e entre os nós com rotações diferentes como um. Esta regra permite identificar interfaces e quantificar sua energia em função dos domínios adjacentes [3].

2. PROCEDIMENTO DE SIMULAÇÃO

O procedimento de simulação empregado no presente estudo é formado por uma microestrutura contínua mapeada em um padrão de rede quadrada bidimensional contendo $N = 40.000$ (200×200) pontos. A cada ponto da rede é atribuído um número S_i , que corresponde à orientação do grão no qual está incorporado. Pontos de rede cristalina adjacentes a outros pontos com diferentes orientações de grãos são considerados separados por contornos de grãos, enquanto um ponto cercado por pontos com a mesma orientação cristalográfica fica contido no interior do mesmo grão. Cada par diferente de vizinhos mais próximos recebe uma energia J , de modo que a energia total do sistema é calculada da seguinte forma:

$$E = \frac{J}{2} \sum_i^N \sum_j^{mn} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (1)$$

A soma em i está em todos os N pontos do sistema, a soma em j está nos pontos vizinhos mais próximos ($mn = 6$) do ponto i , e $\delta_{S_i S_j}$ é o delta de Kronecker. O crescimento de grãos é simulado ao permitir que a orientação de um determinado ponto seja alterada, desde que a energia total seja diminuída ou permaneça inalterada como resultado da mudança de orientação. Os pontos no sistema são simulados em uma ordem aleatória de N , tais tentativas de reorientação são definidas como um passo de Monte Carlo (MCS). O número de passos de Monte Carlo é considerado proporcional ao tempo. A partícula imóvel é introduzida na simulação como local que não pode ser reorientado durante o curso da simulação. Essa suposição resulta em uma igualdade da energia na interface matriz-partícula imóvel e no contorno de grão incoerente em relação à matriz. A partícula imóvel não pode se mover através da estrutura cristalina, o que significa que não é permitido o arrasto da partícula imóvel aos grãos [1,4].

A recristalização primária na presença de partículas é modelada incorporando um termo adicional à equação de expressão de energia (1) que é responsável pela energia armazenada na matriz, geralmente na forma de deslocamentos. Essa energia adicional está presente nos grãos não recristalizados, mas está ausente nos grãos recristalizados. A energia total E é então calculada da seguinte forma:

$$E = \sum_i^N \left[Hf(S_i) + \frac{J}{2} \sum_j^{mn} (1 - \delta_{S_i S_j}) \right] \quad (2)$$

A função $f(S_i)$ é unitária para pontos não recristalizados e zero para pontos e partículas recristalizados. H é a energia armazenada por ponto devido à deformação, que é assumida como uniforme em relação ao material inicialmente não recristalizado. A recristalização ocorre por um processo de nucleação e crescimento. A nucleação é modelada pela adição de um embrião circular no tamanho de 333 pontos ao centro do material no início da simulação (*i.e.* nucleação saturada pontualmente). Esses embriões têm valores de S_i que diferem de todas as outras partículas.

Se H for muito pequeno, o embrião é subcrítico e diminui. O valor de H necessário para o crescimento embrionário depende de sua vizinhança. Se $H/J > 2$, um embrião isolado é supercrítico e pode crescer, tornando-se um novo núcleo de crescimento de grãos. Se $H/J < 2$, o embrião deve estar adjacente a um contorno de grão existente para se tornar um núcleo, seu crescimento ocorre preferencialmente ao longo dos contornos de grãos já existentes. A significância da razão entre energia armazenada e energia de contorno de grão (H/J) em relação ao tamanho inicial de grão é a seguinte: os estudos de simulação anteriores de recristalização [5-6] mostraram que a taxa de crescimento de novos grãos é criticamente dependente da razão H/J e da estrutura de grãos já existentes. Novos grãos com a relação $H/J < 2$ só podem crescer ao longo dos contornos de grãos já existentes, no entanto, para $H/J > 2$, os novos grãos podem crescer na ausência de contornos de grãos preexistentes. À medida que H/J aumenta em direção a 5, a taxa de crescimento de grãos também aumenta, atingindo um valor de saturação porque com H/J alto qualquer ponto na interface da propagação de recristalização pode mudar de não recristalizado para recristalizado. Para H/J , a nucleação espontânea ocorre em toda a rede. Tudo isso implica que apenas uma limitada faixa de H/J pode ser explorada no atual modelo de Monte Carlo [1].

As simulações apresentadas neste trabalho foram realizadas adotando-se algumas suposições de acordo com a referência [7], sendo estas:

- Uma célula deve superar a barreira de energia para atingir seu novo estado e essa barreira de energia está diretamente relacionada à temperatura. De acordo com a mecânica estatística, a porcentagem de átomos que podem superar uma barreira energética é descrita por:

$$P = e^{\left(\frac{-E}{kT}\right)} \quad (3)$$

Onde P é a probabilidade de uma transição bem-sucedida do estado de uma célula, E é a barreira energética, T a temperatura absoluta e k a constante de Boltzmann [7].

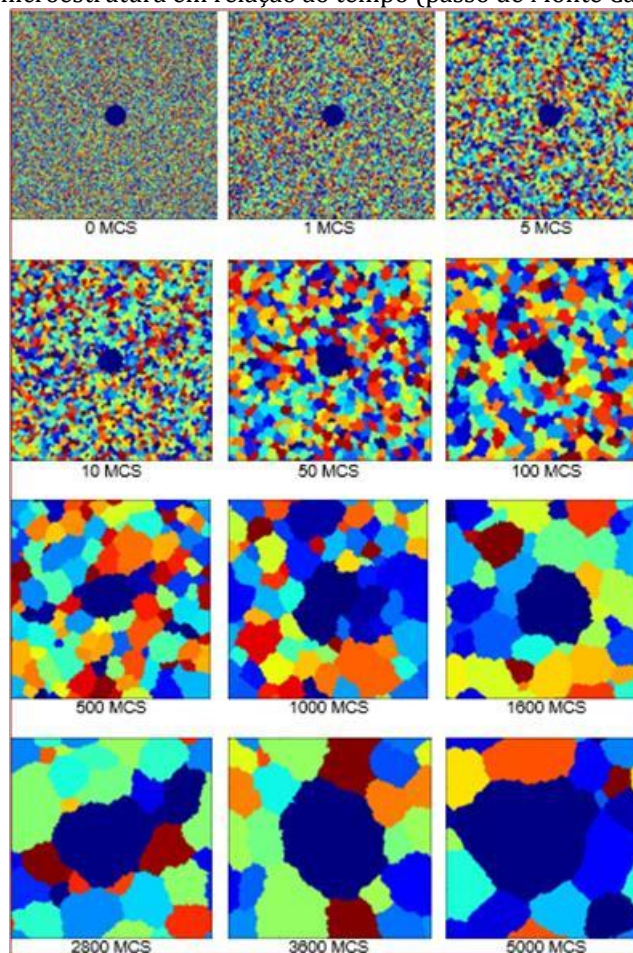
- Uma célula pode ter estados de 1 a Q ($Q \gg 1$) em vez de 0 e 1. Um grande número Q permite evitar o impacto de grãos de orientações semelhantes. No presente trabalho, o número de estados Q adotado foi de 1.000 [7].
- A energia dos contornos de grãos é distribuída homoganeamente. É a natureza do crescimento normal de grãos, significando que uma célula pode assumir o estado de seu vizinho em tempo anterior com igual probabilidade [7].

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para testar a validade do modelo de simulação proposto e examinar um dos casos mais simples de recristalização primária na presença de partículas de segunda fase, foi realizada uma série de simulações nas quais um grão circular e recristalizado (área = 333 pontos) foi introduzido em uma matriz de grãos não recristalizados.

Fig. 1 mostra a evolução da microestrutura com o tempo para uma relação $H/J = 1,01$. Para esse valor de energia armazenada, o grão recristalizado cresce e consome a matriz circundante não recristalizada. Uma análise da cinética de crescimento mostra que a taxa de crescimento do grão recristalizado aumenta com o tempo até atingir um estado estacionário em que sua área cresce conforme o tempo ao quadrado. O centro de curvatura de cada segmento da propagação da recristalização fica fora do grão recristalizado. Essa curvatura, juntamente com a energia armazenada, fornece a força motriz para a evolução da recristalização.

Figura 1 - Evolução da microestrutura em relação ao tempo (passo de Monte Carlo, MCS) para $H/J = 1,01$.



Em contraste com o caso de $H/J = 1,01$, onde o grão recristalizado cresce rapidamente na matriz, como pode ser visto na Fig. 2, a simulação com $H/J = 0,1$ mostra que o crescimento do grão recristalizado é efetivamente impedido pela presença de partículas dispersas. A exceção importante a essas declarações é que, para a menor fração de partículas, o grão em crescimento nunca para de crescer. Um estudo anterior mostrou que uma energia armazenada da ordem de 0,1 é suficiente para a recristalização ocorrer nesses modelos 2D [6]. Portanto, é razoável afirmar que na presença de uma pequena quantidade de partículas a recristalização pode ser concluída.

Figura 2 - Evolução da microestrutura em relação ao tempo (passo de Monte Carlo, MCS) para $H/J = 0,1$.

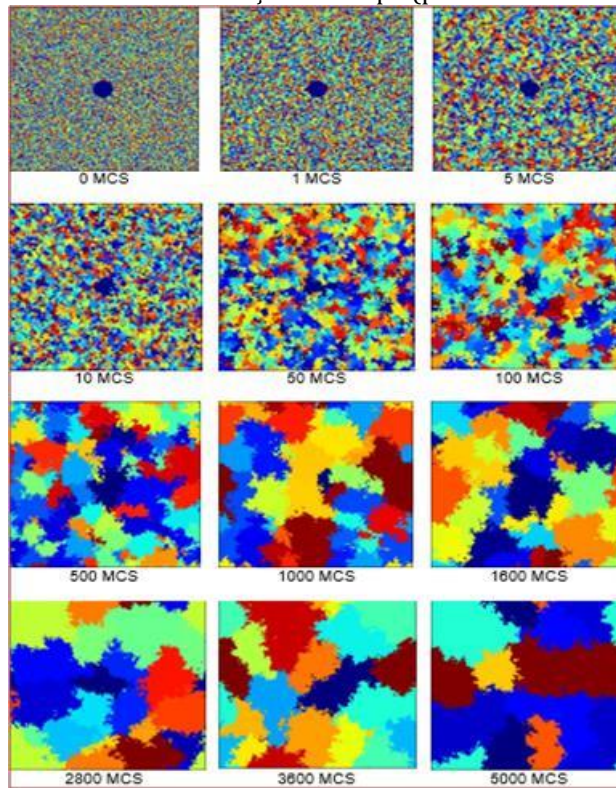
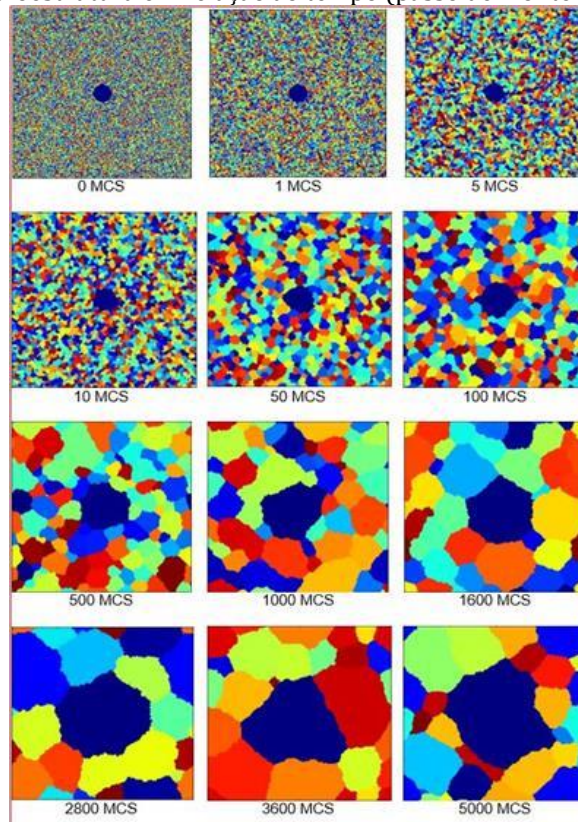


Fig. 3 mostra a evolução microestrutural para uma energia armazenada mais alta, $H/J = 2,01$, onde o crescimento do grão circular imposto ocorre a partir de 0 MCS até obter um tamanho relativamente maior aos 5.000 MCS. Neste caso, a propagação da recristalização tem um padrão mais irregular, o que é esperado para a força motriz simulada, possuindo também centros de curvatura situados fora do novo grão [5].

Figura 3 - Evolução da microestrutura em relação ao tempo (passo de Monte Carlo, MCS) para $H/J = 2,01$.



4. CONCLUSÃO

A presente simulação derivada do modelo de Monte Carlo pôde representar o crescimento normal de grãos, além de vincular os requisitos topológicos e energéticos, fornecendo também informações sobre a cinética de crescimento e evolução da microestrutura.

Durante a simulação de recristalização com energia armazenada suficientemente elevada ($H/J = 2,01$), a propagação da recristalização pôde transpor facilmente as partículas secundárias. Nessas circunstâncias, a cinética de evolução da recristalização não é afetada por tais partículas. Ressaltando que a cinética de um modo geral é afetada, porém por nucleação heterogênea das partículas.

Com energia armazenada intermediária ($H/J = 1,01$), a recristalização depende da existência de uma estrutura de grão prévia. Isto ocorre porque a energia armazenada (1,01) é insuficiente para dar início a nucleação, como a propagação da recristalização e crescimento de grãos ocorridos previamente nos contornos de grãos [6].

Para baixa energia armazenada ($H/J = 0,1$), a propagação da recristalização é fortemente impedida pelas partículas secundárias presentes. Nestas circunstâncias, a evolução da recristalização é fortemente inibida, o que geralmente resulta numa recristalização incompleta.

REFERÊNCIAS

- [1] ROLLETT, A. D. Acta Metall. Mater. v. 40, n. 12, pp. 3475-3495, 1992.
- [2] POTTS, R. B., Proc. Cambridge Philos. Soc. v. 48, n. 106, 1952.
- [3] RAABE, D. Phys. Metall. v. 15, pp. 2291-2397, 2014.
- [4] ASHBY, M. F.; Centamore, R. M. A. Acta Metall. Mater. v. 16, pp. 1081, 1968.
- [5] SROLOVITZ, D. J.; Grest, G. S. and Anderson, M. P. Acta Metall. Mater. v. 34, 1833, 1986.
- [6] SROLOVITZ, D. J.; Grest, G. S.; Anderson, M. P. and Rollett, A. D. Acta Metall. Mater. v. 36, 2115, 1988.
- [7] LIU, Y.; Baudin, T. and Penelle, R. Acta Metall. Mater. v. 34, pp. 1679-1683, 1996.