

COMISIÓN NACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA  
BIBLIOTECA

CNEA-NT 11/83

C.N.E.A. Biblioteca  
ARCHIVO PUBLICACIONES  
Nº 2 1983

01.83.23  
04.83.00

REPUBLICA ARGENTINA  
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA  
Dependiente de la Presidencia de la Nación  
GERENCIA DE DESARROLLO

CALCULO DE LAS VARIACIONES DE ENERGIA  
DE UN BORDE DE GRANÓ ANCLADO POR UNA PARTICULA

A. SARCE

Buenos Aires

1983

Introducción

En numerosos casos es necesario que partículas de segunda fase dispersas en una matriz frenen bordes de grano en movimiento para conseguir, "a posteriori", el crecimiento de determinadas orientaciones cristalinas que llevan a la obtención de mejores propiedades físicas y mecánicas del material. Esa acción de frenado o anclaje, que se produce si el tamaño y distribución de las partículas es adecuado [1], [2], se pone de manifiesto por una modificación de la forma del borde de grano que se desplaza (fig. 1).

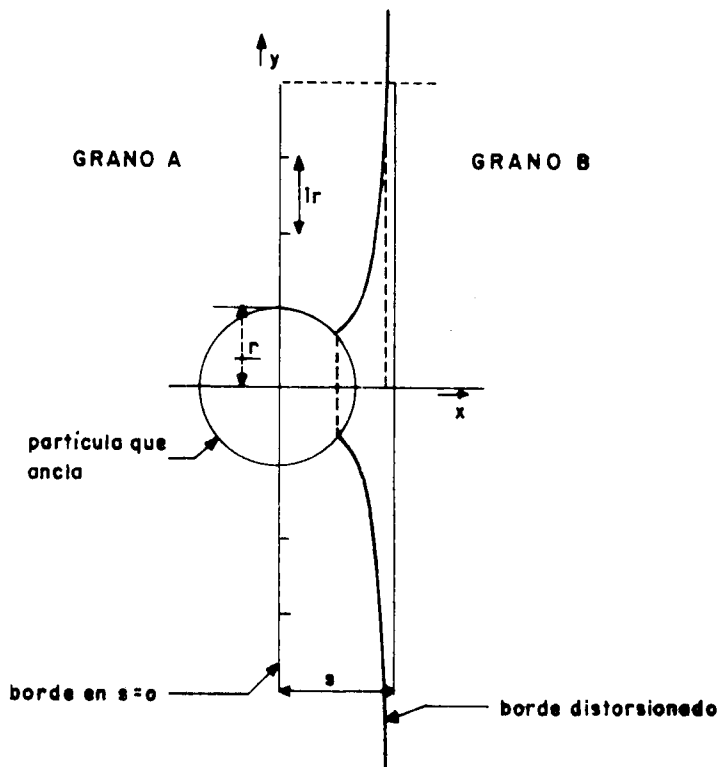


Fig. 1

La forma que adopta el borde de grano anclado por una partícula y el círculo de contacto borde de grano- partícula varían a medida que el primero se aleja de la posición  $x=0$  ( $s=0$ ). Esto implica una variación del área total del borde de grano a medida que tiende a alejarse de la partícula y, asociada a ella una variación de la energía del sistema ( $E_{part.}$ ) que puede escribirse como [1]:

$$E_{part} = E(s) - E(s=0) =$$

$$= \frac{\gamma \pi a}{2} \left\{ \sinh^{-1} \left( \frac{a}{2nr} \right) - \sinh^{-1} \left( \frac{s}{2a} \right) - \left[ 1 + \left( \frac{2nr}{a} \right)^2 \right]^{1/2} + \left[ 1 + \left( \frac{2a}{s} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} - \gamma \pi r^2 (n^2 - 1) \quad (1)$$

donde  $r$  es el radio de la partícula

$$a = s \left[ r^2 - \left( \frac{1}{2} s \right)^2 \right]^{1/2}$$

$s$ : el desplazamiento del borde de grano

$n$ : un número entero, tal que el área del borde de grano afectada por la partícula tiene, en  $s=0$ , el valor  $\pi(nr)^2$ .

y  $\gamma$ : la energía del borde de grano por u. de área.

Por otro lado, cuando un grano de radio  $R$  crece en un policristal a expensas de otros granos de radio medio  $R_0$  se produce una disminución en la energía total del sistema, que resulta del balance entre el aumento de energía asociado al aumento del área del borde de grano del grano que crece y la disminución de energía asociada a la disminución del área de los bordes de grano que son eliminados. Si el desplazamiento  $s$  del borde de grano es muy pequeño con respecto a  $R$ , ese cambio de energía por unidad de área del borde de grano es  $|1|$ :

$$E_{\text{crec}} = \frac{s\gamma}{R_0} \left( \frac{2}{Z} - \frac{3}{2} \right) \quad (2)$$

donde  $Z = \left( \frac{R}{R_0} \right)$

El cambio total de energía que se produce cuando un grano, que tiene uno de sus bordes anclado por una partícula crece de modo que su radio pasa de  $R$  a  $R+s$ , es la suma de los cambios de energía dados por (1) y (2). Antes de efectuar esa suma es necesario considerar que, mientras que (1) da la variación de energía del sistema por partícula, la expresión (2) da la variación de energía por unidad de área, por lo que, para combinar ambas debe reducirse, por ejemplo, la segunda a las unidades de la primera. Para ello debe tenerse en cuenta que, si hay  $n_v$  partículas precipitadas por unidad de volumen, aquellas que interactúan con una unidad de área de borde de grano son  $2rn_v$ , ya que, para que borde de grano y partícula estén en contacto el centro de ésta debe estar a lo sumo a una distancia  $+r$  o  $-r$  del borde, es decir debe de estar dentro del volumen  $2r$ .

Así, la disminución de energía debida al crecimiento de grano por partícula puede escribirse como:

$$E_c = \frac{E_{\text{crec}}}{2n_v r} = \frac{s\gamma}{2n_v r R_0} \left( \frac{2}{Z} - \frac{3}{2} \right)$$

Si  $f$  es la fracción en volumen de partículas esféricas de radio  $r$ ,  $n_v = \frac{3}{4} f \frac{1}{\pi r^3}$  por lo que  $E_c$  resulta  $|1|$  :

$$E_c = \frac{2\pi s \gamma r^2}{3R_0 f} \left( \frac{2}{Z} - \frac{3}{2} \right) \quad (3)$$

El cambio total de energía del sistema asociado con el crecimiento de un grano

que tiene un borde anclado por una partícula es, finalmente

$$E_T = E_{part} + E_c$$

### Cálculo de $E_T$ - Discusión

El cálculo de  $E_T$  para distintos desplazamientos  $s$  del borde de grano puede ser realizado a través de un cálculo de computación (ver apéndice), en el cual es necesario introducir sólo los parámetros  $R_0$ ,  $Z$ ,  $r$ ,  $f$ ,  $\gamma$  y  $n$ .

Usando para ellos los valores  $R_0 = 32 \mu\text{m}$ ,  $z=1.5$ ,  $r=0.105 \mu\text{m}$  y  $f=9 \times 10^{-4}$  medidos en chapas de Fe-3%Si en las cuales partículas precipitadas de Mn S frenan bordes de grano de recristalización primaria [3],  $\gamma=1000 \text{ erg/cm}^2$  y  $n=10$ , se obtiene la curva mostrada en la fig.2.

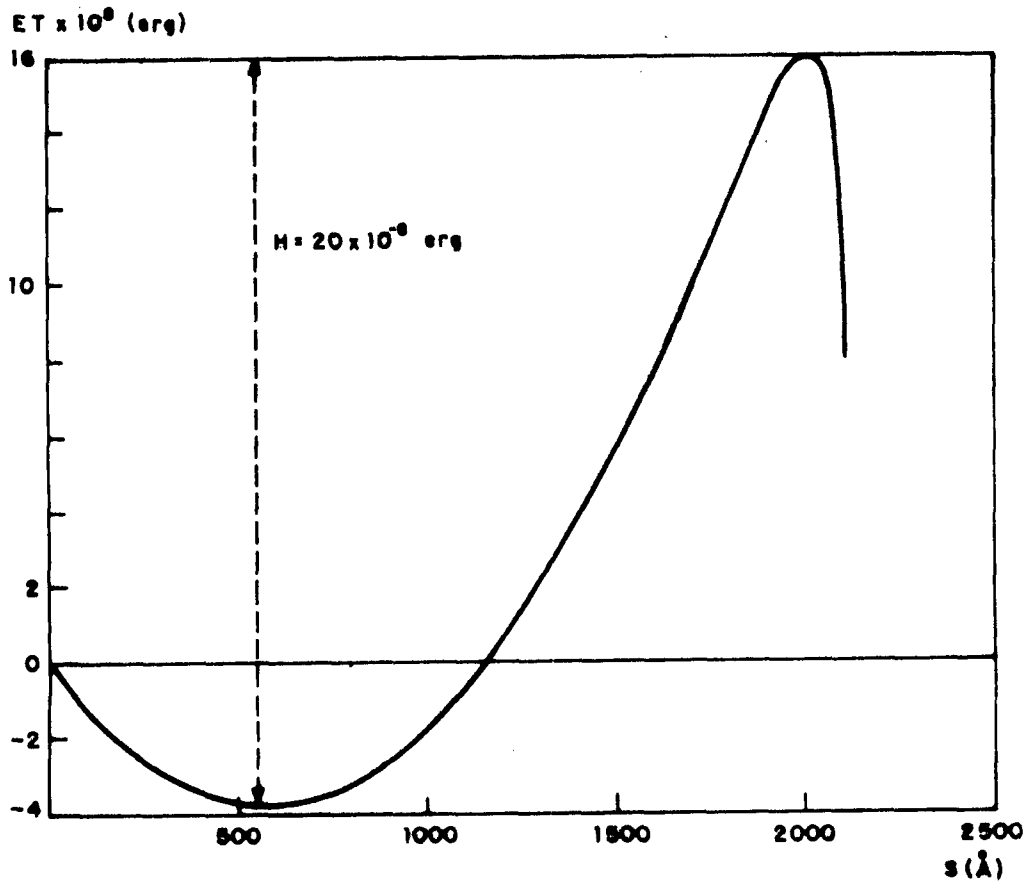


Fig.- 2 Variación de la energía del sistema vs. desplazamiento. Parámetros usados en el trazado de la curva:  $r=0.105 \mu\text{m}$ ;  $R_0 = 32 \mu\text{m}$ ;  $Z=1.5$ ;  $f=9 \times 10^{-4}$ ;  $\gamma=1000 \text{ erg/cm}^2$ ;  $n=10$ .

La barrera de energía  $H=20 \times 10^{-8}$  erg que se encuentra, es la barrera que debe ser sobrepasada para que el borde de grano pueda moverse desanclándose de la partícula que inicialmente lo frenaba.

A menos que la velocidad de decrecimiento de energía del sistema debida al crecimiento de grano sea mayor que la máxima velocidad de aumento de energía de bida al anclaje, existirá siempre esa barrera de energía  $H$ , y su valor es, en el fondo, una medida de cuán efectivas en el frenado son las partículas presentes.

El valor de la barrera de energía es función de los parámetros introducidos en el cálculo. La variación de  $H$  con  $Z$  es mostrada en la fig. 3.

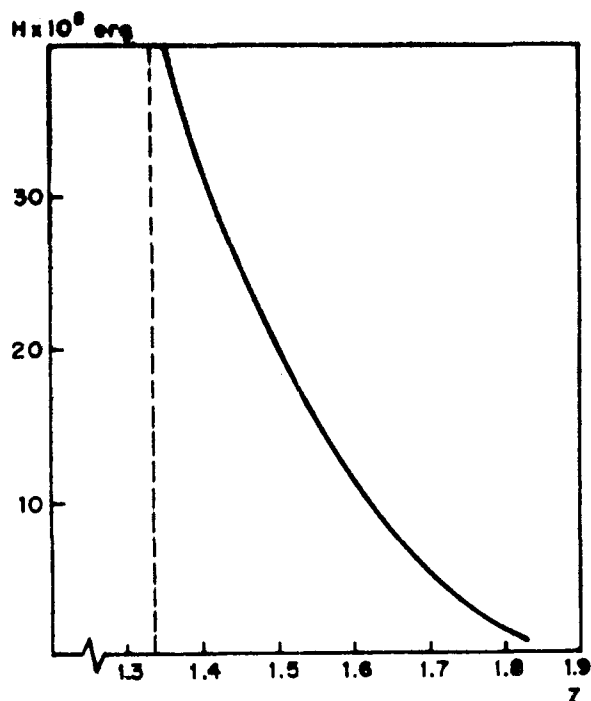


Fig. - 3 Variación de la barrera de energía  $H$  con  $Z = R/R_0$ . Los otros parámetros usados en el cálculo de ET son los mismos de la fig. 2.

Para valores de  $Z$  mayores que 1.9, la barrera de energía es prácticamente cero, lo que indica que, cuando la diferencia de tamaño entre el grano que crece y los de la matriz es grande, las partículas no llegan a frenar los bordes de grano en movimiento. Para valores de  $Z < 1.33$  no se produce crecimiento debido a que, no sólo  $E_{part.} > 0$  sino también  $E_c > 0$ . Esto muestra que el efecto de las partículas sobre los bordes de grano no sólo depende de las características de ellas (tamaño, distribución y cantidad), sino de las características de la matriz en las cuales han precipitado, (tamaño de grano medio  $R_0$  y relación  $Z = R/R_0$ ).

La curva de la variación de  $H$  con la fracción en volumen de partículas (fig.4) muestra que  $H$  aumenta con  $f$ .

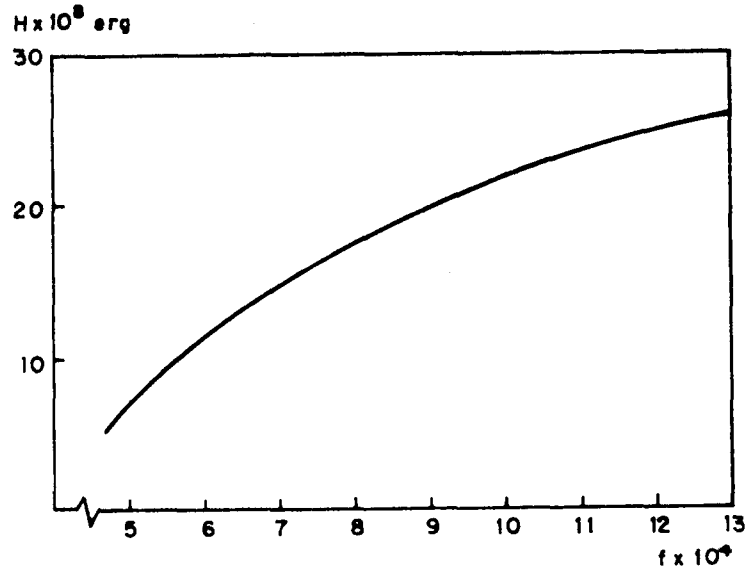


Fig. 4 - Variación de la barrera de energía  $H$  con la fracción en volumen  $f$ . Valores de los otros parámetros:  $r=0.105\mu\text{m}$ ;  $R_0=32\mu\text{m}$ ;  $z=1.5$ ;  $\gamma=1000$  erg/cm<sup>2</sup> ;  $n=10$ .

Finalmente, variando  $r$ , y manteniendo los otros parámetros fijos en los valores tomados inicialmente, puede observarse (fig.5) que la barrera de energía  $H$  pasa un valor máximo para un valor intermedio de radio de las partículas precipitadas, decreciendo para valores mayores de él. Esto indica que, para una dada fracción en volumen de partículas, hay un tamaño crítico para el cual el efecto de frenado sobre el borde de grano es máximo y que, partículas muy pequeñas o de un cierto radio en adelante no ejercen sobre él ningún efecto.

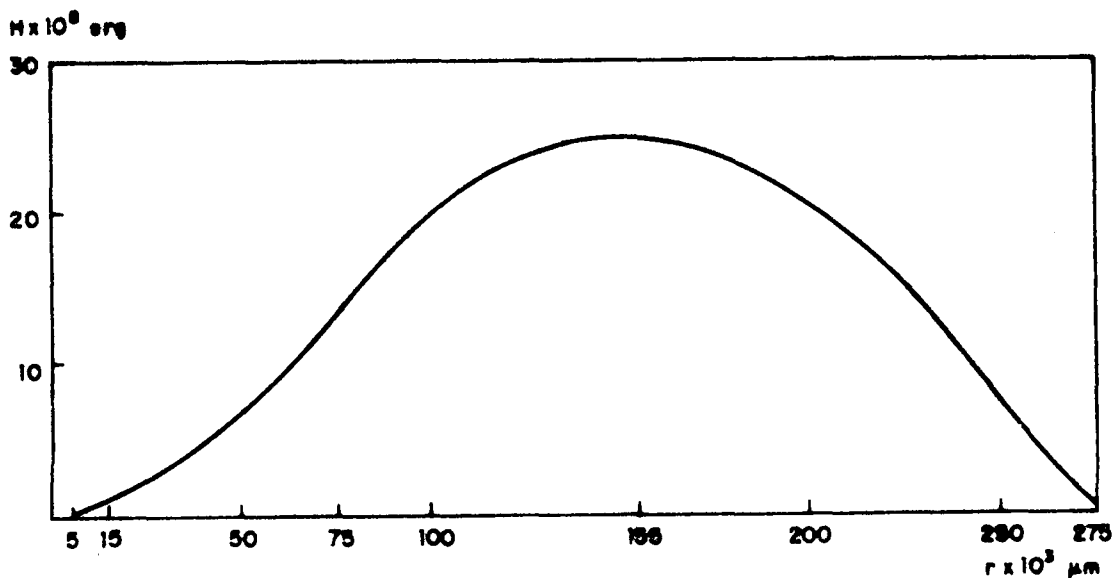


Fig. 5 - Variación de la barrera de energía  $H$  con el radio  $r$  de partículas precipitadas. Para valores de  $r < 0,015\mu\text{m}$  y  $r > 0.275\mu\text{m}$  es  $H=0$ . Para  $r=0.155\mu\text{m}$   $H$  es máxima.

### Conclusiones

La importancia del trazado de las curvas  $E_T(s)$  usando parámetros experimentales, y del conocimiento de la variación de la barrera de energía con ellos (fundamentalmente con  $r$ ), reside en el hecho de que, de su observación puede predecirse si las partículas presentes son o no efectivas en el frenado de los bordes de grano, y si, por ejemplo, el tamaño que poseen es aquél que lleva a un máximo de rendimiento en ese frenado.

Dado que la distribución y tamaño de las partículas de segunda fase precipitadas pueden ser modificadas mediante tratamientos termomecánicos, las curvas anteriores pueden ser tomadas como base para la programación adecuada de los mismos.

BIBLIOGRAFIA

1. - Gladman T, - Proc. Roy. Soc. A 294 (1966) 298-309
2. - Hillert M., Scandinavian Journal of Metallurgy, 4 (1975) 211-219.
3. - A. Sarce, A. Cabo, "Efecto de partículas de segunda fase en la recristalización de chapas Fe-3%Si" - a publicarse -

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Dr. A. Cabo las sugerencias y discusiones mantenidas.



APENDICE

a) Programa para el cálculo de ET(s).

FILE: EN FORTRAN B CNEA VM/SP CMS REL 1.1 PLC07

```
DIMENSION ET(23,9),N(9),S(23),E(23,9)
DIMENSION A(23),B(23),C(23,9),J(23,9),CE(23,9),CES(23,9)
DIMENSION X(23),H(23),G(23,9),P(23,9),XE(23),XES(23)
DIMENSION Q(23),V(23),U(9),T(23)
2  FORMAT(2F10.4)
3  FORMAT(10(I2,1X))
5  FORMAT(8F10.4)
  READ(5,2)GAMA,Z
  READ(5,5)R,RO,F
  READ(5,3)N(K),K=1,5)
  READ(5,5)(S(J),J=1,23)
10 DO 10J=1,23
  A(J)=R**2-(0.5*S(J))**2
11 DO 11J=1,23
  B(J)=SQRT(A(J))
  DO 12K=1,5
  DO 12J=1,23
12 C(J,K)=S(J)*B(J)/(2.*N(K)*R)**2)
  DO 27K=1,5
  DO 27J=1,23
27 CE(J,K)=(C(J,K))**2+1
  DO 28K=1,5
  DO 28J=1,23
28 CES(J,K)=SQRT(CE(J,K))
  DO 13K=1,5
  DO 13J=1,23
13 D(J,K)=ALOG(C(J,K)+CES(J,K))
  DO 14J=1,23
14 X(J)=S(J)/(2.*B(J))
  DO 29J=1,23
29 XE(J)=(X(J))**2+1)
  DO 30J=1,23
30 XES(J)=SQRT(XE(J))
  DO 15J=1,23
15 H(J)=ALOG(X(J)+XES(J))
  DO 16K=1,5
  DO 16J=1,23
16 G(J,K)=(1.+(4.*(N(K)*R)**4/(S(J)**2*A(J))))
  DO 17K=1,5
  DO 17J=1,23
17 P(J,K)=SQRT(G(J,K))
  DO 18J=1,23
18 Q(J)=(1.+(4.*A(J))/S(J)**2)
  DO 19J=1,23
19 V(J)=SQRT(Q(J))
  DO 20K=1,5
20 U(K)=R**2*(N(K)**2-1.)
  DO 21J=1,23
21 T(J)=2.*S(J)*R**2*(2./Z-3./2.)/(3.*RO*F)
  DO 60K=1,5
  DO 60J=1,23
60 E(J,K)=(D(J,K)-H(J)-P(J,K)+V(J))*(0.5*S(J)*B(J))
  DO 22K=1,5
  DO 22J=1,23
22 ET(J,K)=3.14*GAMA*(0.5*S(J)*B(J))*(D(J,K)-H(J)-P(J,K)+V(J))+
```

FILE: EN FORTRAN B CNEA VM/SP CMS REL 1.1 PLC07

```
10(K)-T(J))
  DO 23K=1,5
23 WRITE(6,5)(ET(J,K),J=1,23)
  STOP
  END
```

b) Datos

FILE: EN	DAIOS	B	CNEA	VM/SP	CMS	REL	1.1	PLC07
1000	.105							
2	4	6	8	10				
	1.5							
	.32	.00						
					.0009			
					.0200		.0400	.0500
					.0900		.1100	.1200
					.1700		.1900	.2000
								.0550
								.1300
								.2099
								.0600
								.1400

c) Salida: -ET(s) para n = 2,4,6,8,10.

FILE: SALI	DATOS	B	CNEA	VM/SP	CMS	REL	I.1	PLC07			
0.0665	1.2777	2.2352	3.0342	3.6116	3.9703	4.0674	4.1090				
-4.7804	3.7191	3.1330	2.4273	1.4324	0.2225	-1.2227	-2.8928				
0.0672	-9.8706	-9.1330	-11.5051	-13.8375	-15.6524	-9.9658	3.8661				
3.7058	1.2207	2.2102	1.8595	3.4981	3.7972	3.8605	3.6922				
-5.5894	3.3171	2.7013	1.8363	0.7944	-0.4894	-1.9882					
0.0668	-7.6590	-9.8641	-12.1363	-14.3182	-15.9255	-9.9683	3.8206				
3.6459	1.2196	2.2050	2.5572	3.4766	3.7645	3.8219	3.8403				
-5.7393	3.2422	2.6113	1.7536	0.6748	-0.6212	-2.1299					
0.0664	-7.8055	-9.9996	-12.2531	-14.4071	-15.9762	-9.9685	3.8044				
3.6238	1.2190	2.2029	2.9535	3.4691	3.7557	3.8083	3.8921				
-5.7919	3.2154	2.5795	1.7160	0.6318	-0.6676	-2.1800					
0.0668	-7.8568	-10.0465	-12.2939	-14.4378	-15.9938	-9.9689	3.8002				
3.6176	1.2074	2.2040	2.9527	3.4678	3.7523	3.8032	3.9135				
-5.8150	-7.8782	-10.0671	-12.3100	-14.4451	-15.9992	-2.2006	-9.9666				