

# ¿RESULTA EQUIVALENTE ESTUDIAR EL EFECTO DE FRENADO DE PARTÍCULAS INMÓVILES EN EL CRECIMIENTO DE GRANO EN POLICRISTALES 2D O 3D POR MÉTODO DE MONTE CARLO?

## IS EQUIVALENT THE DRAG EFFECT ON THE GRAIN GROWTH WITH IN MOBILE PARTICLES IN 2D AND 3D MONTE CARLO SIMULATIONS?

C.L. Di Prinzio\*, E. Druetta, O.B.Nasello\*

Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba.  
Ciudad Universitaria (5000) Córdoba, Argentina.

\*INVESTIGADOR DEL CONICET  
e-mail: [nasello@famaf.unc.edu.ar](mailto:nasello@famaf.unc.edu.ar)

Recibido 30/03/2012; aprobado 01/02/2013

En este trabajo se realizaron simulaciones de CG (CG) en 2D y en 3D con partículas inmóviles utilizando técnicas de Monte Carlo. Las muestras utilizadas tenían una dimensión entre 100x100x100 a 400x400x400 en el caso 3D y en el caso 2D fueron estudiadas muestras de 300x300. Las muestras tenían partículas inmóviles cúbicas de lados 1, 3 y 5 y sus concentraciones volumétricas  $f$  fueron entre 2% a 70% para 3D y solo partículas inmóviles cuadradas de lados 1, 2 y 3 con concentraciones de área  $f$  entre 2% a 15% para 2D. En las simulaciones se calculaba el tamaño de grano medio. Se encontró que las partículas frenan el CG y los granos alcanzan un tamaño límite. En este trabajo se encontró que las muestras 3D siguen la ley de frenado propuesta por Zener, mientras que las partículas 2D no lo hacen.

Palabras Claves: Monte Carlo, CG 2D, CG 3D, precipitados

In this work we performed simulations of grain growth (GG) in 2D and 3D with stationary particles using Monte Carlo techniques. The size of the simulation samples were between 100x100x100 to 400x400x400 in the case of 3D and 300x300 in the 2D case. The samples had cubic static particles which sizes were 1, 3 and 5 and their volume concentrations  $f_v$  were between 2% to 70% for 3D, and square static particles, which sizes were 1, 2 and 3 with surface concentrations  $f_s$  between 2% to 15% for 2D. The average grain size was calculated during Monte Carlo simulation. The particles in the sample stopped the grain growth and the grains reached a limit size  $R_l$ . In this work we found that only the results for 3D samples follow Zener's law.

Key words: Monte Carlo, Grain Growth. Particles drag.

### I. INTRODUCCIÓN

Wormer y Hazzledine (1992) [1] hacen una detallada revisión de todas las aplicaciones del frenado del CG por partículas de segunda fase o poros. En general el CG con partículas inmóviles o segunda fase es ampliamente estudiado en metales y cerámicos para poder controlar el tamaño de grano y así las propiedades magnéticas, eléctricas y mecánicas de los mismos.

Smith (1948) [2] citó el trabajo de Clarence Zener donde se determinaba la fuerza máxima producida por una única partícula esférica a un borde de grano en 3D. En textos recientes (Sutton y Balluffi) (1995)[3] se encuentra en forma teórica una relación entre el tamaño límite  $R_l$  de los granos, el tamaño de la partícula  $r$  y la concentración volumétrica de partículas  $f_v$ , dada por:

$$\frac{R_l}{r} = a f_v^b \quad (1)$$

donde los parámetros  $a=3/4$  y  $b=-1$  siendo conocido este resultado como efecto Smith-Zener. En estos trabajos se asume fuertemente que todas las partículas en el volumen están distribuidas uniformemente y se supone que la intersección entre las partículas y el borde de grano es al azar.

Durante muchos años se estudió el CG en muestras policristalinas con partículas inmóviles mediante diferentes técnicas teóricas y computacionales. En la tabla 1 se presentan los trabajos realizados en CG es muestras policristalinas bidimensionales (2D) con partículas inmóviles. En dicha tabla se presentan los

valores de a y b encontrados por diferentes autores y las características generales de la muestra usada y del método teórico o computacional empleado. En los trabajos computacionales se da información del radio y concentración de las partículas empleadas. Podemos ver en general que para muestras policristalinas 2D los valores de a y b difieren del encontrado por Zener [2-3]. En la tabla 2 se presentan las características de las investigaciones realizadas usando diferentes técnicas computacionales en CG es muestras policristalinas tridimensionales (3D) al igual que en la tabla 1, Por los resultados presentados se deduce que el CG en muestras policristalinas 3D con partículas inmóviles siguen la ecuación teórica de Zener [2].

De las simulaciones de CG realizadas hasta el presente por métodos como Monte Carlo y Campo de fases y por

diferentes autores se pueden encontrar varios aspectos remarcables:

- 1) Las simulaciones de CG en 2D siguen en general una ley del tipo dada por la ecuación (1) con  $b=-1/2$  para concentraciones entre 0.01% y 15%.
- 2) Los autores que estudiaron CG en 2D con distintos tamaños de partículas obtuvieron que la relación (1) se cumplía independiente del tamaño de partículas. Sin embargo no todos tienen el mismo criterio para asignarle el radio a las partículas. [10,11,12,16]
- 3) En general se observan que las partículas poseen una distribución aleatoria pero que en algunos casos las mismas se tocan o superponen. Este efecto puede interpretarse por partículas de mayor tamaño.

TABLA 1: Valores obtenidos de a, b en simulaciones o trabajos teóricos en muestras 2D por diferentes autores (se indica el numero de referencia). Dimensiones de las muestras utilizadas, concentraciones, tamaño de partículas y radio inicial de los granos

Referencias y Autores	Características: Dimensiones de la muestra, método empleado y radio inicial de los granos	a	b	Concentración partículas y radio de las partículas.
2) C. S. Smith, Trans. Metall. Soc. A.I.M.E. 175, 15 (1948).	Teórico. Partículas distribuidas al azar	1,3	-1	
4) M. P. Anderson, D.J. Srolovitz G.S. Grest, P.S Sahni., Acta Metall. 32, (1984a),78 5) D.J. Srolovitz M. P. Anderson, P.S Sahni., G.S. Grest, Acta Metall. 32, (1984b),793	Sin partículas. Distribución de tamaño de grano, la topología y la dinámica local 200x200 Monte Carlo			
6) D.J. Srolovitz, M. P. Anderson, G.S. Grest, P.S Sahni., Acta Metall. 32,9, (1984c),1429	200x200 Monte Carlo R0=1	1,7	0,5	f=0,5% a 5% r=1
7) R. D. Doherty, D. J. Srolovitz, A. D. Rollett, and M. P. Anderson., Scripta Metall. 21, 675 (1987)	No hacen simulaciones. Análisis Teórico	1,7	-0,5	f=0,5% a 5% r=1
8) M. Hillert, Acta Metall. 36, 3177 (1988).	No hacen simulaciones. Análisis Teórico	1,7	0,5	Para todo f
10) Hassold G. N. , Holm E. A., Srolovitz D.J., Scripta Metallurgica et Materialia (1990), vol24, pp 101-105	200x200 Monte Carlo R0=1	0,9	0,58	f=0,1% a 10% r=1,2,7,4,6,6,5 y 8.6.
11) Jinhua Gao, Raymon G. Thompson y Burton R. Patterson, Acta Materialia, vol 45, nro 9, (1997) pp 3653-3658.	500x500 Monte Carlo R0=5?	0,9	0,52	f=0,1% a 15% r=1,2,3
12) Soucail M. Messina R., Cosnuau A., y Kubin L. P., Materials Science and Engineering A271 (1999) pp1-7.	2000x2000 Monte Carlo R0=1	0,9	0,52	f=0,01% a 10% r=1,3,7
14) Moelans N., Blanpain B., Wollants P., Acta Materialia, (2006), vol. 54, pp1175	1024x1024 R0=1 Campo medio	1,28	0,5	f=0,4% a 16% r=2,5 , 3

Solamente. Hassold G. N [10] vió que el efecto de agrupamiento (clustering) de partículas afectaba el CG.

4) En general se observa que en muestras policristalina 2D, la fracción de partículas en el borde de grano [6] es casi la misma que el volumen.

5) Las simulaciones de CG en 3D siguen en general una ley del tipo dada por la ecuación (1) con b entre -0,33 y -1, para concentraciones entre 0.25% y 15%.

6) No hay autores que estudiaron CG en 3D con distintos tamaños de partículas, por lo tanto no se puede ver si la relación (1) es válida para cualquier tamaño de partículas.

7) Los autores en general omiten el valor de energía de activación de las simulaciones [4-5] y ese factor produce

muchos cambios en la dinámica de la simulación.

De los resultados previos presentados podemos ver que el CG en 2D y 3D con partículas inmóviles es diferente. Se observa mucha discrepancia en el valor de b y a en las muestras 3D. En este trabajo se investigará el CG en muestras policristalinas 2D y 3D con partículas de distinto tamaño y concentración para poder encontrar la relación existente entre las variables de la ecuación (1). Para ello se empleará el mismo algoritmo y se mantendrán los fijos los parámetros del modelo como el radio inicial, la energía de activación, y el tamaño de la muestra.

TABLA 2: Valores obtenidos de a, b en simulaciones o trabajos teóricos en muestras 3D por diferentes autores (se indica el numero de referencia). Dimensiones de las muestras utilizadas, concentraciones, tamaño de partículas y radio inicial de los granos

Referencias y Autores	Características: Dimensiones de la muestra, método empleado y radio inicial de los granos	a	b	Concentración partículas y radio de las partículas.
13) Miodownik M., Holm E.A., Hassold G. Scripta Materialia, vol42, (2000) pp1173-1177.	400x400x400	0,72	-1	f=0,25% y 15% r=1
16) Suwa Y. , Saito Y., Onodera H. , Scripta Metall. 55, 407-410 (2006)	400x400x400 R0=0 campo medio	1,42	-0,87	f=4% a 12% r=1
9)Anderson	100x100x100 Monte Carlo R0=1	4,5	-0,31	f=0,5% a 5% r=1
2) C. S. Smith, Trans. Metall. Soc. A.I.M.E. 175, 15 (1948).	Teórico.Partículas distribuidas al azar	1,3	-1	
8) M. Hillert, Acta Metall. 36, 3177 (1988).	No hacen simulaciones. Análisis Teórico	0,2	-0.93	f>10%
		1,8	-0,33	f<10%

## II. MÉTODOS

Se simuló CG en muestras 2D y 3D con fracciones de partículas inmóviles en el rango de 2% a 70% y se aplicó el mismo algoritmo de Monte Carlo desarrollado en [9].

Según la concentración de partículas las muestras tenían un tamaño entre 300x300 para 2D y entre 100x100x100 y 400x400x400 para 3D. La simulaciones fueron realizadas en una PC i5 con 4Mb RAM. El proceso más largo duró aproximadamente 6 meses e involucró una muestra de 400x400x400 con una concentración de

partículas del 2% con 300.000 pasos de Monte Carlo (MCS).

Las simulaciones de CG en 2D fueron realizadas con partículas inmóviles que no se superponían. Se estudiaron 3 diferentes tamaños de partículas cuadradas, y sus lados eran de 1, 2 y 3 puntos. Los radios de las mismas fueron calculados usando el área de un círculo equivalente. Las concentraciones usadas van de 2% a 15% 1)

Las simulaciones de CG en 3D fueron realizadas con partículas inmóviles que se superponían o se tocaban, como se pudo ver en los trabajos de otros autores. Este efecto fue más notable a alta concentración y cuando las partículas tiene radio más chico. Se estudiaron 3

diferentes tamaños de partículas cúbicas, y sus lados eran de 1, 3 y 5 puntos. Los radios de las mismas fueron calculados usando el volumen de una esfera equivalente. Las concentraciones usadas van de 2% a 70%. Las muestras 3D utilizadas para bajas concentraciones tenían un tamaño de 400x400x400 al igual que el utilizado en [13]. Para altas concentraciones se usaron muestras 3D de 200x200x200 y de 100x100x100. El valor de la energía de activación en todas las simulaciones 2D y 3D fue de 0,1KT. (donde k es la constante de Boltzmann y T fue fijado en 273 K)

### III RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSIÓN:

Los resultados obtenidos para CG en 2D están presentados en la figura 1. El  $\ln(R/r)$  en función de  $\ln(fv)$  presenta un comportamiento lineal, donde se puede extraer los parámetros de la ecuación (1) como  $a=1,7$  y  $b=-0,46$ . Como se puede ver este comportamiento fue el mismo para los tres tamaños de partículas estudiadas. En general se observó que casi todas las partículas estaban en el borde de grano. El valor de b y a coinciden en general con los otros autores, pero esta en desacuerdo con la teoría de Zener.

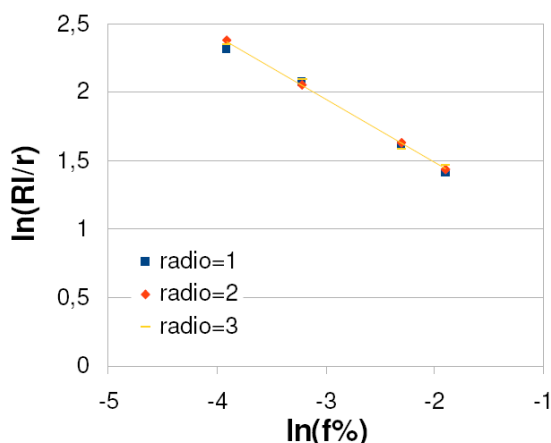


Figura 1:  $\ln(R/r)$  vs  $\ln(fv)$  para muestras 2D de 300x300 con partículas cuadradas de lados 1,2 y 3.

Los resultados obtenidos para CG en 3D están presentados en la figura 2. El  $\ln(R/r)$  en función de  $\ln(fv)$  presenta un comportamiento similar para las muestras con partículas de lado 3 y 5. Para baja concentración los valores son similares a los obtenidos en [13] y la relación obtenida es lineal con pendiente cercana a -1, sin embargo para altas concentraciones la pendiente aumenta a -0,5.

Un comportamiento distinto tenemos cuando las muestras tiene partículas de lado 1. Los valores obtenidos son mucho más grandes que los anteriores. Muchas simulaciones fueron realizadas y los resultados fueron los mismos.

Observando las muestras se notó que las partículas se tocaban o se superponían. Eso a nuestro entender se puede interpretar como un cambio en el tamaño de las

partículas iniciales.

De esta manera se procedió a recalcularse el tamaño de las partículas para todas las muestras estudiadas.

Se realizó un método de intercepción lineal tridimensional. Se calculó sobre un segmento orientado al azar de longitud fija, el número de veces que interceptaba una partícula N y que largo L de su longitud total eran ocupados por sitios de partículas. De

esta manera el radio promedio  $r_p = \frac{l}{N}$ . De esta

manera se observó que  $r_p \geq r$ . Las muestras 3D con partículas de tamaño 3 y 5 con baja concentración no reportaron cambio en la recalculación del tamaño de partícula. Para alta concentración de partículas de tamaño 3 y 5, el tamaño de las partículas cambió levemente. Para las muestras con partículas de tamaño 1 se encontró que los radios cambiaban significativamente para todas las concentraciones. De esta manera se recalculó  $\ln(R/r)$  usando  $r_p$ . En la figura 3 se observa el valor de  $\ln(R/r_p)$  vs.  $\ln(fv)$ .

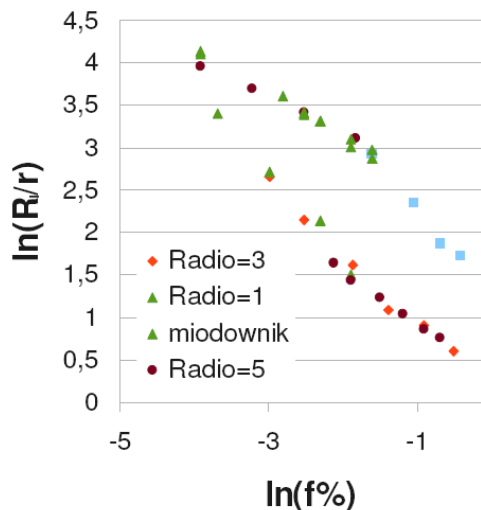


Figura 2:  $\ln(R/r)$  vs  $\ln(fv)$  para muestras 3D de diferentes tamaños con partículas de lados 1,3 y 5.

Podemos por lo tanto observar en la figura 3 que usando el tamaño adecuado de las partículas la relación (1) se cumple para cualquier tamaño y concentración de partículas. Los valores de a y b resultaron ser 0.9 y -1 que son cercanos a los obtenidos por Zener [3].

### IV CONCLUSIONES:

En este trabajo se estudió el CG con partículas inmóviles en muestras 2D y 3D mediante el método de Monte Carlo. Se encontró en la bibliografía muchos resultados en 2D y bastante concordantes entre si. En general se puede ver que los bordes de grano en 2D se frenan más rápido y no son tan dependientes de la distribución de las partículas. El movimiento de los bordes de grano en 2D es causado por una única

curvatura y la misma es anulada al ir facetándose cuando el borde de grano se ancla entre partículas. Al no tener los bordes de grano otra fuerza que genere el movimiento, el CG se frena considerablemente. Por lo tanto la ley de Zener no se cumple para CG en muestras 2D.

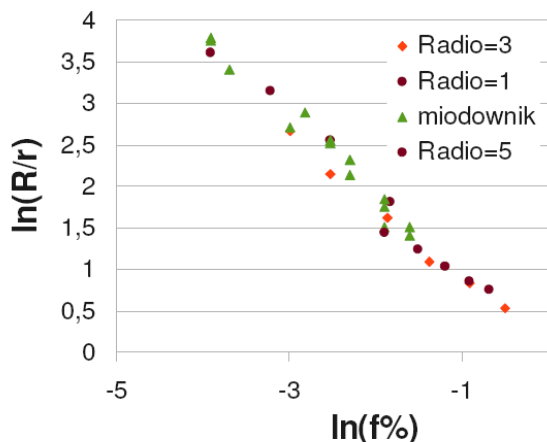


Figura 3: Ln(R/r) vs Ln(fv%) para muestras 3D con diferentes tamaños recalculados de partículas. A modo de identificar los grupos de muestras se mantuvo la misma clasificación de los radios 1, 3 y 5.

En muestras 3D, la bibliografía es muy escasa y no muchos experimentos se han hecho con partículas de distinto radio.

Los resultados encontrados para el CG con partículas de distinto tamaño fue bastante difícil de interpretar. Para partículas de lado 1 se puede ver que en general las partículas se tocan para todas las concentraciones mayores de 5%. Eso genera partículas de radio mayor distribuidas en la muestra que causa distribuciones no homogénea de partículas.

Si las partículas son de lado 3 o 5 las partículas no se tocan en general hasta concentraciones bastante altas, por lo cual el efecto de la distribución de partículas no es un problema.

Los resultados encontrados con partículas de lado 1 fueron modificados al utilizar un tamaño promedio de las partículas y los mismos coinciden bastante bien con aquellos encontrados con partículas más grandes.

Finalmente podemos decir la ley de Zener es correcta y se puede aplicar en muestras 3D. Dicha ley es claramente observable en las muestras 3D con partículas

de radio 3 y 5, cuyos tamaños no se modificaron.

## Referencias

1. Worner, C H | Hazzledine, P M, (1992) JOM (USA).. 44, 9, 16-20.
2. Smith C. S., (1948), Trans. Metall. Soc. A.I.M.E. 175, 15 .
3. Sutton A. P. and Balluffi R. W., (1995), Interfaces in Crystalline Materials, Elsevier Science Ltd., Oxford .
4. Anderson M. P., Srolovitz D.J. Grest G.S., Sahni P.S., (1984), Acta Metall. 32, 78.
5. Srolovitz D.J. , Anderson M. P., Sahni P.S., Grest G.S. ,(1984), Acta Metall. 32, ,793
6. Srolovitz D.J, Anderson M. P., Grest G.S., Sahni P.S.,(1984) Acta Metall. 32,9,1429.
7. Doherty R. D., Srolovitz D. J., Rollett A. D., and Anderson M. P., (1987), Scripta Metall. 21, 675
8. Hillert M., (1988). Acta Metall. 36, 3177
9. Anderson M. P. , Grest G. S., Doherty R. D. Li K. Srolovitz D. J., (1989), Scripta Metall. 23, 753-758
10. Hassold G. N. , Holm E. A., Srolovitz D.J., , (1990), Scripta Metallurgica et Materialia, vol24, pp 101-105.
11. Jinhua Gao, Thompson R. G. y Patterson B. R., (1997), Acta Materialia, vol 45, nro 9, pp 3653-3658.
12. Soucail M. Messina R., Cosnuau A., y Kubin L. P., , (1999). Materials Science and Engineering A271 pp1-7.
13. Miodownik M., Holm E.A., Hassold G. , (2000), Scripta Materialia, vol42,pp1173-1177.
14. Moelans N., Blanpain B., Wollants P., (2006) Acta Materialia, vol. 54,pp1175
15. Moelans N., Blanpain B., Wollants P., (2007), Acta Materialia ,vol. 55,pp2173.
16. Suwa Y. , Saito Y., Onodera H. , (2006), Scripta Metall. 55, 407-410.

**Agradecimientos:** Este trabajo se realizó gracias al apoyo económico del PID CONICET 2010-2012 nro: 11220090100537: "Estudio de las interfaces en hielo: Aplicación a hielo natural" y a la colaboración técnica del Sr. José Barcelona.