

ESTUDIO DEL EFECTO ZENER CON UN MODELO NUMERICO

C. M. Scavuzzo, M. A. Ré y O. B. Nasello*

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba, Laprida 854, 5000 Córdoba

Los resultados teóricos y experimentales sobre el frenado de un borde de grano en su migración debido a la presencia de inclusiones (efecto Zener) no son absolutamente concluyentes y en algunos casos son contradictorios.

En una comunicación anterior¹ se presentó un modelo numérico que permite simular la migración de un borde de grano en bicristales tridimensionales, cuando la fuerza impulsora estaba dada por capilaridad y/o diferencia de energía libre entre los cristales de la muestra. De la comparación de los resultados del modelo para la migración de un borde en bicristales, con los correspondientes a experiencias de laboratorio puede concluirse que los mecanismos que dominan el proceso en los casos estudiados, son la curvatura del borde de grano y la condición que el mismo entre a 90° con la interfase hielo-aire.

En este trabajo se simula la interacción de un borde de grano con un arreglo periódico de inclusiones esféricas. El borde migra impulsado por una diferencia de energía libre entre los cristales y es frenado por las inclusiones. De los resultados obtenidos puede verse que los valores predichos por Zener para el frenado sólo son válidos para densidades de inclusiones bajas.

INTRODUCCION

El proceso de migración del límite de grano modifica la microestructura de un material, la que a su vez determina las propiedades mecánicas del material, por lo que su estudio es de interés en la física de materiales.

Este proceso está condicionado tanto por la cantidad de impurezas solubles presentes en el material como por la densidad y tamaño de partículas de una segunda fase dispersa.

Si bien los mecanismos que dominan la migración de los bordes de grano y su cinética han sido ampliamente estudiados^{2,3} aún quedan problemas sin resolver. En particular, un tema que sigue en estudio es la influencia que las partículas de una segunda fase dispersa tienen sobre la migración de los bordes de grano (efecto Zener).

Respecto a este punto Nes et al.⁴ presentan los resultados de Zener, quien predice que la presión que ejerce una distribución dispersa de partículas es

$$P = \pi R \gamma \eta_s = \pi R \gamma \eta_v / 2R \quad (1)$$

donde R = radio de las inclusiones, γ = energía del borde, η_s = densidad de partículas en el límite de grano y η_v = densidad volumétrica de partículas.

Estos autores muestran, además, que en otros trabajos se encuentran discrepancias, en algunos casos, significativas con lo predicho por Zener.

En este trabajo se presenta un estudio numérico del efecto Zener para distintos radios y densidad de inclusiones. El modelo de simulación utilizado corresponde a la migración de un borde de grano impulsado por capilaridad, con la presión dada por

$$P = \gamma \left[\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right] \quad (2)$$

ρ_1 y ρ_2 radios principales de (2) curvatura del borde de grano.

y/o por diferencia de energía entre cristales, en muestras bicristalinas en tres dimensiones¹.

En este modelo el borde está representado paraméricamente según $z = \sum (x, y)$, con z la distancia sobre la vertical del borde de grano a la base.

Una de las verificaciones efectuadas del modelo consistió en la comparación de las predicciones del mismo con lo observado para la migración de un borde de grano en una interfase hielo-aire. El acuerdo observado entre ambos resultados permite concluir que el modelo incluye los mecanismos relevantes que gobiernan el proceso, lo que a su vez permite generalizar la situación a la interacción de un borde con burbujas de aire.

RESULTADOS

Para los experimentos se usaron arreglos periódicos infinitos de inclusiones esféricas sobre un plano $z = \text{cte}$. El borde de grano era originalmente plano e impulsado por una diferencia de energía libre entre los cristales, U_{ab} , constante y tal que, en

* Investigador del CONICET

todos los casos, su velocidad de desplazamiento ante de alcanzar el plano de inclusiones era de un punto por paso de simulación.

La Figura 1 muestra una situación típica al atravesar el borde el plano de inclusiones. Si bien las formas que adopta el borde de grano en sus sucesivas posiciones al atravesar el arreglo de burbujas son similares a las que muestran Ashby et al.⁵, no puede realizarse una comparación directa, dado que los resultados encontrados por Ashby fueron para posiciones de equilibrio mientras que en nuestro caso el borde está en movimiento.

En la Figura 2 se presenta el gráfico de la altura media del borde de grano para un dado instante, \bar{z} , en función del paso de computadora. La forma de la curva es similar a la presentada por Cepi y Nasello⁶ usando un modelo bidimensional. Puede verse que el frenado se pone de manifiesto luego de que el límite cruza el ecuador de las burbujas (punto "A" de la figura). Además vemos que entre los puntos "A" y "B" ("B" corresponde a la posición desde la cual el límite recupera su forma plana) la velocidad del límite es constante. De aquí puede concluirse que la presión, promedia sobre la superficie del límite, permanece constante durante ese intervalo de tiempo.

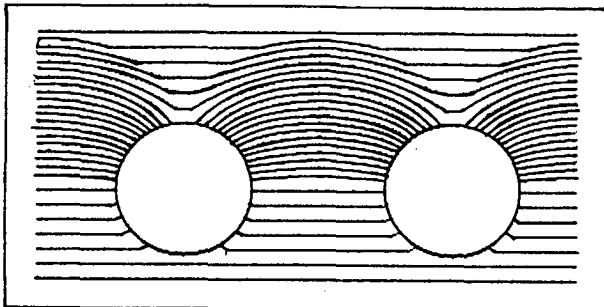


Figura 1: Situación típica al atravesar el borde el plano de inclusiones.

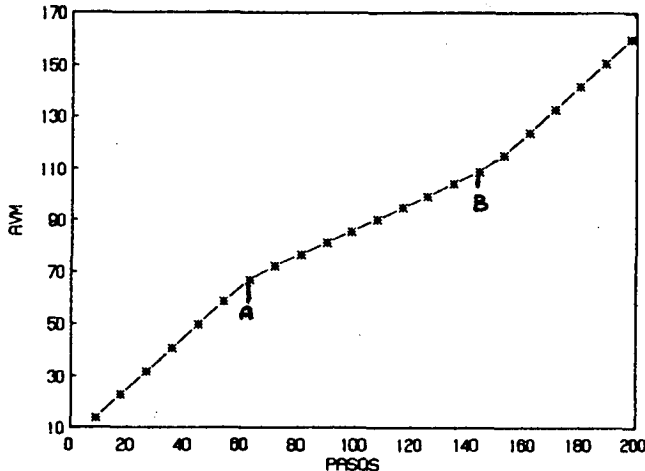


Figura 2: Altura media del borde de grano vs paso de computadora

La Figura 3 es un gráfico de $\bar{V} (d\bar{z}/dt)$ en función del radio de las inclusiones, R , para una densidad, η_s igual a una inclusión cada $(174)^2$ (puntos de red)². En este gráfico se observa un comportamiento lineal en acuerdo con la ecuación (1). Sin embargo los valores de presión obtenidos (P_d), resultan en general mucho más grandes que los predichos por esta ecuación. En efecto, teniendo en cuenta que $V = V_0 - MP$, el gráfico de V vs. η_s para $R = 20$ puntos (figura 4), nos muestra que la presión de frenado se hace mayor que de Zener para densidades por encima de una inclusión cada $(400)^2$ (puntos de red)². Cabe destacar además que la presión de frenado no es lineal con η_s .

Estos resultados sugieren que lo propuesto por Zener sería válido sólo para bajas densidades.

Debe notarse que el apartamiento encontrado entre P_d y P_z es de una naturaleza diferente al presentado por Louat⁷, Ashby et al.⁵ Hunderi et al.⁸. En efecto, estos autores suponen que la presión de frenado ejercida por cada partícula no depende de η_s y encuentran diferencias con las predicciones de Zener como consecuencia de un cálculo diferente de la densidad de partículas que, en promedio, interactúa con el borde de grano.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos sugieren que la presión de frenado por partícula depende fuertemente de la densidad de partículas η_s . Por otra parte, se ve que este frenado es sólo consecuencia de la curvatura del límite de grano y la imposición de que el límite entre a 90° en la burbuja ya que ninguna otra fuerza está involucrada en el proceso simulado.

Los valores de frenado predichos por Zener sólo parecen válidos para densidades de partículas muy bajas que no siempre son las que se encuentran. En

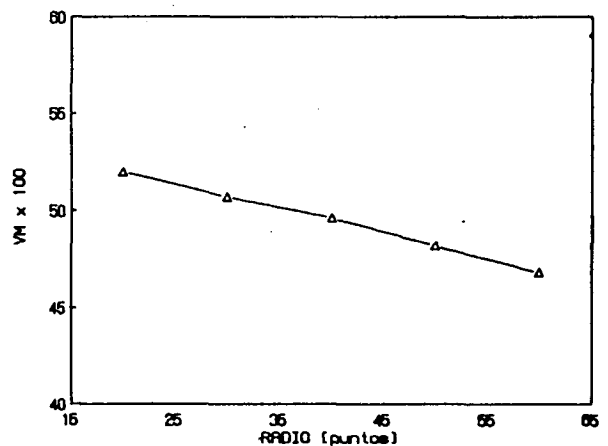


Figura 3: $\bar{V} (d\bar{z}/dt)$ vs. radio de las inclusiones.

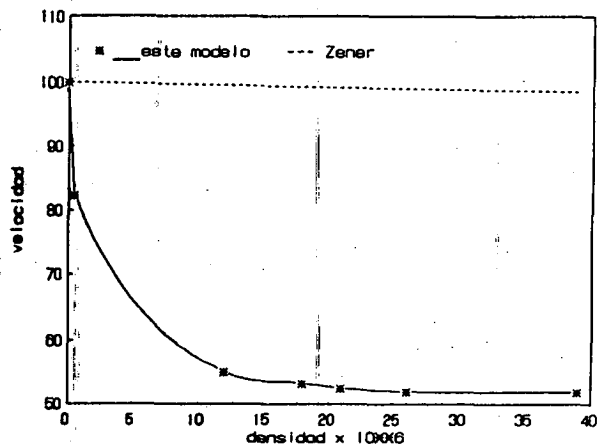


Figura 4: V vs. n_s para $R = 20$ puntos.

particular, para granizos naturales las densidades de burbujas son $\cong 1/3$ o para distintas aleaciones son comunes valores de $1/10$, en cuyos casos no sería apropiado utilizar la expresión de Zener.

REFERENCIAS

1. C. M. Scavuzzo, M. A. Ré, E. A. Ceppi, "Simulación de la migración del límite de grano en bicristales tridimensionales", presentación en la 73ª AFA, 1988.
2. "Progress in material science", 16 by B. Chalmers, J. W. Christian y T. B. Massalski, Pergamon Press, 1972.
3. "Computer simulation of microstructural evolution" by D. J. Srolovitz, Metallurgical Society, 1985.
4. E. Nes, N. Ryum, O. Hunderi, Acta Met 33, 1, pp 11-22.
5. F. Ashby, J. Harper, J. Lewis, Trans. Metall. Soc. A. I. M. E. 245, pp 413-20.
6. E. Ceppi, O. B. Nasello en (3).
7. N. Louat, Acta Met. 30, pp 1291-94.
8. O. Hunderi, E. Nes, N. Ryum, Acta Met 37, 1, pp 129-33, 1989.