

## **SIMULACIÓN MONTE CARLO DEL CRECIMIENTO DE GRANO ANORMAL**

**Carlos Oldani, Ignacio Lucero**

*Departamento Materiales y Tecnología - Facultad Ciencias Exactas, Físicas y Naturales  
Universidad Nacional de Córdoba, Vélez Sársfield 1611 (X5016GCA) Córdoba, Argentina*

**Palabras Clave:** Crecimiento de grano, Monte Carlo, Crecimiento anormal, Simulación.

**Resumen.** Durante el proceso de recocido de aceros de uso eléctrico, comercialmente conocidos como laminaciones, se puede producir un crecimiento de grano anormal debido a la presencia de partículas de segunda fase, tales como los nitruros de aluminio, en los bordes de grano. Estas partículas anclan el movimiento de dichos límites en los lugares donde están presente, provocando el crecimiento de sólo unos pocos granos que llegan a tamaños muy grandes a expensas de otros más pequeños que desaparecen.

El método Monte Carlo permite, con buena aproximación, la simulación del crecimiento de grano “normal”, y si se le imponen determinadas condiciones se puede conseguir que simule el crecimiento canibalístico correspondiente al crecimiento anormal de grano.

En este trabajo se proponen condiciones para la presencia de partículas en la microestructura. Se trabajó sobre el campo de influencia de las mismas y sobre la determinación de una tasa de disolución según el modelo de Aaron Kotler.

## 1 INTRODUCCION

Los aceros de bajo carbono de uso eléctrico (laminaciones) consiguen buenas propiedades magnéticas a partir de un tratamiento térmico de recocido donde se produce un importante crecimiento de grano. Este debe dar una microestructura de tamaño de grano homogéneo con un diámetro medio en el orden de los 150  $\mu\text{m}$  (Oldani , 2003). Sin embargo, la presencia de partículas de segunda fase, como son los NAI, provocan crecimiento anormal de grano con el desarrollo canibalístico de sólo algunos granos grandes en una matriz de granos pequeños.

El método de simulación Monte Carlo (Srolovitz et al., 1984) ha mostrado ser útil para describir el fenómeno de crecimiento normal de grano. La incorporación en la simulación de anclajes al movimiento de bordes de grano para provocar crecimiento anómalo, no está acabadamente resuelto.

En este trabajo se busca incorporar al modelo Monte Carlo modificado (Oldani y Lucero 2007), las condiciones básicas para simular el crecimiento de grano anormal debido a la presencia de partículas en la microestructura.

### 1.1 Condiciones para el crecimiento anormal de grano

El crecimiento anormal de grano consiste en la migración de algunos pocos bordes de grano, llevando a una estructura que contiene pocos granos marcadamente grandes en medio de una matriz de granos finos. Para que aparezca, deben existir ciertas condiciones iniciales:

- inhibición del crecimiento normal de granos
- granos iniciales de tamaño mayor al medio de la matriz

aunque ninguna de las dos condiciones son suficientes para que aparezcan granos anormales.

El método más importante de inhibición del crecimiento está relacionado con la presencia de partículas de segunda fase. Estas, al ubicarse en los bordes de grano, disminuyen el área del mismo y por lo tanto, la energía total asociada a éste. Es decir, una partícula atravesada por un borde de grano constituye una situación de mínima energía.

Zener en su comunicación a Smith (1948) definió la fuerza de frenado,  $f_p$ , ejercida por una partícula como:

$$f_p = \pi r \gamma \quad (1)$$

donde  $r$  es el radio de la partícula y  $\gamma$  es la energía superficial del borde. En el caso de partículas distribuidas aleatoriamente:

$$f_p = -\frac{3f \gamma \beta}{2 r_0} \quad (2)$$

donde  $f$  es la fracción volumétrica de partículas,  $\beta$  es la curvatura del borde de grano por la presencia de la partícula,  $\gamma$  es la energía del borde por unidad de área y  $r_0$  es el radio medio de las partículas.

Por otro lado, la fuerza para que el grano normal crezca viene expresada por:

$$f_G = \frac{2 \gamma \beta}{R_0} \quad (3)$$

donde  $R_0$  es el radio medio de los granos de la matriz.

En el momento que la suma de ambas fuerzas sea nula, estaremos en el equilibrio entre el anclaje y el crecimiento. De (2) y (3) se tiene:

$$R_0 = \frac{4 r_0}{3 f} \quad (4)$$

De la misma manera, Gladman (1966) propone que la fuerza de crecimiento actuando sobre un grano con ventaja de tamaño es:

$$F_G = \frac{\gamma \beta}{R_0} \left( \frac{3}{2} - \frac{2}{Z} \right) \quad (5)$$

donde Z es la ventaja de tamaño del grano anormal sobre el de la matriz ( $Z = R/R_0$ ) siendo R el radio del grano anormal.

## 2 MODELO CON ANCLAJE

### 2.1 Campo local

La incorporación de anclajes al modelo Monte Carlo se ha llevado a cabo principalmente considerando que éstos son invariantes (Blikstein et al., 1999). De esta manera, su efecto es local, es decir, cada cambio de estructura es en la práctica, independiente del estado del resto de la estructura. El modelo considera que cada partícula es en sí un grano que no sufre variación. Para lograr este efecto se asignan a los puntos correspondientes a cada partícula la orientación  $Q = 0$  y en el programa se introducen filtros que evitan que dichos puntos sean propuestos para evaluar.

La ubicación de una fracción de celdas con orientación nula no es adecuada para la simulación ya que los granos siguen creciendo en forma normal y simplemente envuelven las partículas a su paso. Esto se soluciona considerando partículas de varias celdas de diámetro ya que el borde que intersecta una de ellas sufrirá el efecto de anclaje. Pero surge la pregunta: cuál es el tamaño de partícula que ejerce este efecto y cuál es su relación entre su tamaño y el real en un acero experimental? Realizando un cálculo simple se verá que:

- las partículas que se quieren representar, NAl, tienen un radio medio de  $0.25 \mu\text{m}$  ( $0.196 \mu\text{m}^2$ )
- Si les asignamos un radio mínimo de 3 celdas, cada grano de  $100 \mu\text{m}$  estará representado por 1200 celdas de diámetro.
- Para tener al menos 100 granos en la simulación, la matriz debería ser de al menos 10600 celdas de lado.

Claramente resulta inviable realizar simulaciones con ese tamaño de matriz. Sin embargo, este modelo se puede utilizar para obtener información cuantitativa sobre la naturaleza del fenómeno de anclado.

### 2.2 Campo promedio

Para mantener la relación de tamaños entre las partículas y los granos, se propuso combinar el modelo discreto clásico con un campo promedio que obligue al modelo a comportarse como indican las ecuaciones de Zener y Gladman que gobiernan el fenómeno.

Nuestro algoritmo ya posee un seguimiento dinámico del tamaño de todos los granos (Oldani y Lucero, 2007) y ahora se le agrega un mecanismo para mantener la información del diámetro de los anclajes, el ritmo de disolución y la evolución de la fracción volumétrica de partículas. En rasgos generales los pasos del algoritmo propuesto son:

- ubicar partículas de distinto diámetro con una distribución estadística normal alrededor del diámetro de partícula supuesto
- al principio de cada paso Monte Carlo (MCS) proceder a achicar todas las partículas por difusión
- según el radio medio de los granos de la matriz, ir frenando el crecimiento normal para que alcance asintóticamente el tamaño previsto por Zener (ecuación 4)
- en cada reorientación propuesta, verificar si el grano en cuestión supera el tamaño crítico definido por Gladman (ecuación 5) para que el grano pueda crecer anormalmente.

Se debe aclarar que en este trabajo se consideró sólo la etapa de disolución de partículas correspondiente al modelo de crecimiento de precipitados de Ostwald ripening debido a que la fuerza de anclaje disminuye con el aumento del tamaño de la partícula, como se ve en la ecuación 2. Esto hace que las partículas importantes en el fenómeno de anclaje de borde de grano sean sólo aquellos precipitados suficientemente pequeños.

Para la disminución del tamaño de las partículas por difusión, se siguió el modelo para partículas esféricas de Aaron Kotler (Dutra et al., 2002), quien plantea que el tiempo de disolución es:

$$t = \frac{r_0^2}{K_s D} \quad (6)$$

donde  $r_0$  es el radio de la partícula,  $D$  es el coeficiente de difusión y  $K_s$  es un coeficiente de supersaturación definido como:

$$K_s = \frac{2(C_1 - C_M)}{(C_p - C_1)} \quad (7)$$

con  $C_1$ = concentración de átomos soluto en la interfase,  $C_p$ = concentración de soluto en la partícula y  $C_M$ = soluto en la matriz. Al no disponer de estos valores se tomó a  $K_s$  como una constante a ajustar. Para el coeficiente de difusión se consideró el valor de difusión de nitrógeno en hierro.

### 3 APLICACIÓN AL MODELO MONTE CARLO

#### 3.1 Inhibición del crecimiento normal

Las ecuaciones 2 y 3 gobiernan el crecimiento normal de granos y su posibilidad de anclaje. Para no afectar la distribución de tamaños de grano, se aplicó una fuerza de frenado proporcional a la fuerza neta de crecimiento normal. Este factor multiplica directamente la probabilidad de transición en el algoritmo Monte Carlo.

#### 3.2 Desanclado de granos para crecimiento anormal

La condición para el crecimiento anormal se deduce de la ecuación 5 (Lucero, 2006):

$$F_N = \left( \frac{1}{R_0} \left( \frac{3}{2} - \frac{2}{Z} \right) - \frac{3f}{4r_0} \right) > 0 \quad (8)$$

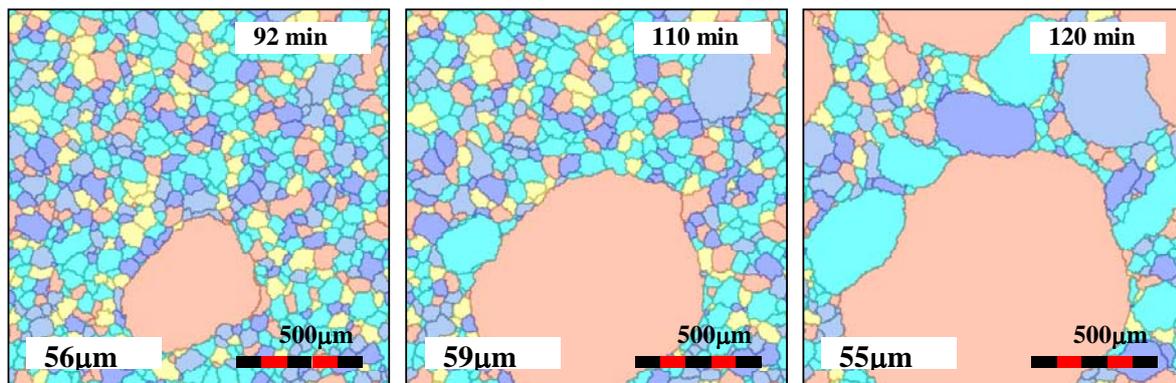
Si  $F_N$  cumple esta condición no se aplican las condiciones de crecimiento normal.

### 3.3 Dispersión inicial de partículas

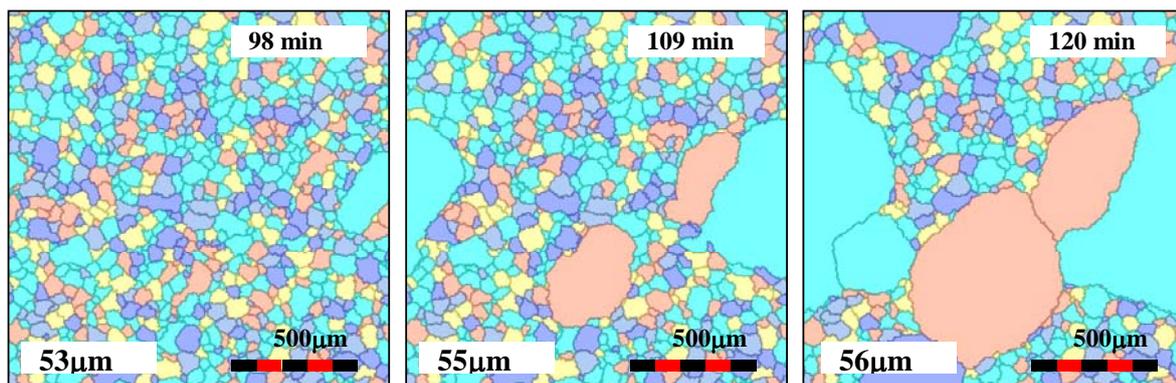
Se consideró que las partículas no eran todas de igual tamaño y por lo tanto se tomó una distribución normal de diámetros. El parámetro de ajuste es la dispersión,  $\sigma$ .

## 4 RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES

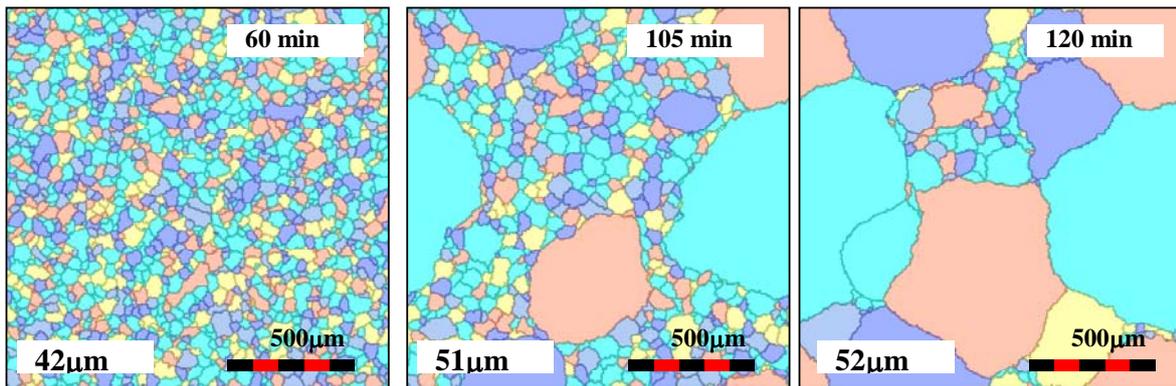
Para establecer los efectos causados por el coeficiente de supersaturación,  $K_S$ , y la dispersión inicial de tamaños de partículas,  $\sigma$ , se llevaron a cabo una serie de simulaciones a las diferentes temperaturas de tratamiento térmico (600 a 900 °C). Como ejemplos de los resultados, en las Figuras 1 a 4 se ve la evolución microestructural para diferentes condiciones de los parámetros. A modo de comparación, en la Figura 5 se muestra la microestructura dúplex de un acero eléctrico tratado térmicamente a 700 °C.



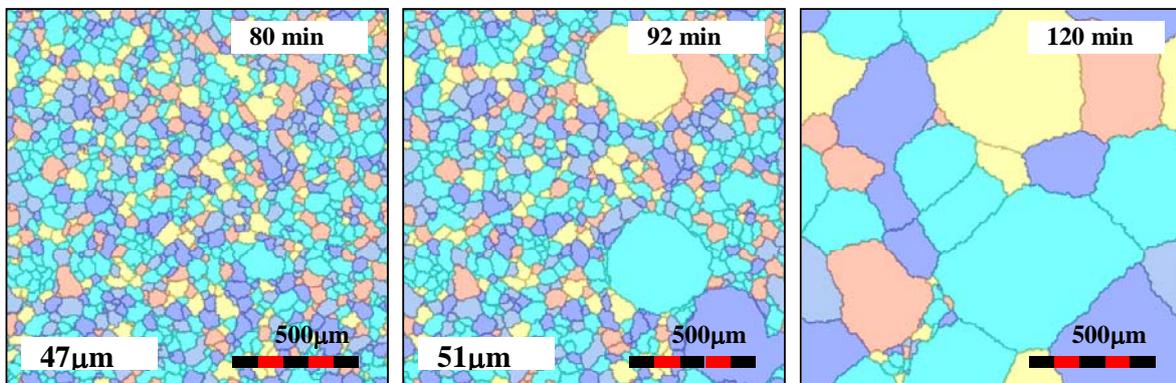
**Figura 1:** Aparición y evolución de granos anormales a 700 °C.  $K_S = 4 E^{-7}$ ;  $\sigma = 0.15$ . Se indica el tamaño de grano medio de la matriz y el tiempo real de evolución..



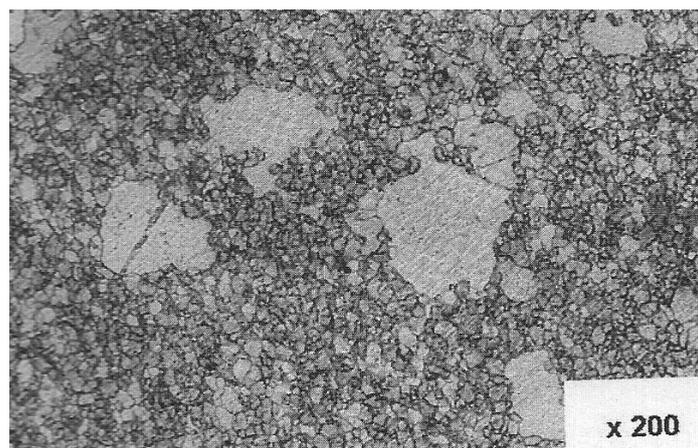
**Figura 2:** Aparición y evolución de granos anormales a 700 °C.  $K_S = 3 E^{-7}$ ;  $\sigma = 0.15$ . Se indica el tamaño de grano medio de la matriz y el tiempo real de evolución..



**Figura 3:** Aparición y evolución de granos anormales a 700 °C.  $K_S = 3 E^{-7}$ ;  $\sigma = 0.10$ . Se indica el tamaño de grano medio de la matriz y el tiempo real de evolución..



**Figura 4:** Aparición y evolución de granos anormales a 700 °C.  $K_S = 3 E^{-7}$ ;  $\sigma = 0.05$ . Se indica el tamaño de grano medio de la matriz y el tiempo real de evolución.



**Figura 5:** Microestructura duplex de una laminación de acero luego de un calentamiento a 700 °C (Oldani y Silvetti, 2000)

## 5 CONCLUSIONES

De este trabajo se puede concluir que:

- El método Monte Carlo es adecuado para la simulación del crecimiento anormal de grano
- Para obtener resultados concordantes con la realidad se requiere escalar las variables y se deben aplicar factores de corrección a la probabilidad de transición. En nuestro caso, los valores de dichos factores se obtuvieron a través del análisis de datos experimentales de tratamientos térmicos de un acero de uso eléctrico
- Los factores involucrados que se usaron como variables de ajuste son: el coeficiente de supersaturación,  $K_S$ , y la dispersión inicial de tamaños de partículas,  $\sigma$
- El modelo propuesto tiene en cuenta las ecuaciones de Zener y Gladman que gobiernan la aparición y crecimiento de granos anormales .

## REFERENCES

- P. Blikstein, A. Tschiptschin; *Mat. Research*, vol.2, n°.3, 133 (1999)
- J. Dutra, F. Siciliano, A. Padilha. Interaction between second-phase particle dissolution and abnormal grain growth in austenitic stainless steel, *Mat. Res.* vol.5 n°.3 São Carlos July/Sept. 2002
- T. Gladman. On the theory of the effect of the precipitate particles on grain growth in metals. *Proceedings of the Royal Society* vol.194A, 298-309, 1966
- I. Lucero. Simulación de la cinética de crecimiento de granos en aceros. *Trabajo Final de la Carrera de Ingeniería Mecánica Electricista – Universidad Nacional de Córdoba 2006*
- C.Oldani, S.P. Silvetti. Microstructure and texture evolution during the annealing of a lamination steel. *Scripta Mater.* vol. 43, n° 2, 129-134, 2000
- C.Oldani. Crecimiento de grano en aceros de uso eléctrico. *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional de Córdoba 2003
- C.Oldani, I. Lucero. Una nueva aproximación a la simulación del crecimiento de grano por Monte Carlo. *Anales del Congreso SAM/CONAMET 2007* San Nicolás, Argentina
- D. Srolovitz, M. Anderson, G. Grest, P. Sahni. Computer simulation of grain growth. *Acta Metall.* vol.32, n° 5, 783-791, 1984
- C. Smith. Grain shapes and interfaces: an interpretation of microstructure. *Trans. AIME* vol.175, 15-51, Feb.1948