

# CURVATURAS: MEDIDAS E COMPARAÇÃO COM MODELOS GEOMÉTRICOS

Gláucio Soares da Fonseca<sup>1</sup>  
Fabiana Pinto Miguel Augusto<sup>2</sup>  
Paulo Rangel Rios<sup>3</sup>

## Resumo

A curvatura média do contorno de grão, a curvatura média das arestas do grão e a curvatura média do grão foram medidas em amostras de estrutura cúbica de face centrada (liga Al-1% massa Mn) e em amostras de estrutura cúbica de corpo centrado (aço elétrico de grãos não orientados, aço microligado ao nióbio, aço livre de intersticiais e ferro puro). Modelos geométricos simples em função do comprimento médio das intersecções dos grãos foram usados como parâmetro de comparação, apresentando boa concordância com os dados experimentais.

**Palavras-chave:** Curvatura; Contorno de grão; Regras de Plateau.

## CURVATURES: MEASURES AND COMPARISON WITH GEOMETRIC MODELS

### Abstracts

The average grain boundary curvature, average edge curvature and average grain curvature were measured in face centered cubic structure samples (Al-1mass% Mn alloy) and in body centered cubic structure samples (electric steel of non-oriented grains, Niobium-low alloyed steel, steel interstitial free and pure iron specimen). The resulting experimental data is compared with existing geometric models relating these three curvatures to the mean intercept length of the grains. The models showed good agreement with experimental data.

**Key words:** Curvature; Average grain; Plateau Rules.

## I INTRODUÇÃO

A microestrutura de metais é formada por grãos, ou seja, regiões tridimensionais sólidas que possuem átomos com mesma orientação cristalográfica, separadas de seus vizinhos pelo contorno de grão.

Fazendo uma análise bidimensional do encontro de três grãos em uma liga considerada isotrópica, o ângulo de equilíbrio entre eles deve ser igual a  $120^\circ$ , como representado por a na Figura 1. Em três dimensões os ângulos tetraedrais devem ser aproximadamente iguais a  $109,47^\circ$ , como apresentado pela Figura 1, de acordo com a referência 1.

As leis citadas acima são conhecidas como as regras de Plateau, e uma rede cristalina está em equilíbrio quando respeita essas exigências.

Na realidade, os grãos de uma amostra se encontram num estado de equilíbrio chamado metaestável, isto é, estado de mínima energia local para certas condições do processo, tais como temperatura e pressão. Para manter o balanço de energia e satisfazer as condições angulares de cerca de  $120^\circ$  e  $109,47^\circ$  as interfaces assumem uma forma curva.

A curvatura do contorno de grão é então um parâmetro importante de uma microestrutura.

Os primeiros trabalhos em relação à curvatura surgiram com a idéia de curvatura média da interface. Esses trabalhos reportaram métodos estereológicos por meio dos quais, a curvatura

<sup>1</sup>Engenheiro Químico, Mestre e Doutor em Engenharia Metalúrgica, Professor Adjunto na Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR) da Universidade Federal Fluminense (UFF). Av. dos Trabalhadores, 420 - 27255-250 - Volta Redonda, RJ, Brasil. glaucio@metal.eeimvr.uff.br

<sup>2</sup>Engenheira de Produção, Mestre em Engenharia Metalúrgica pela Universidade Federal Fluminense (UFF). Av. dos Trabalhadores, 420 - 27255-250 - Volta Redonda, RJ, Brasil. fapma25@hotmail.com.

<sup>3</sup>Engenheiro Metalúrgico, Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Professor Titular na Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR) da Universidade Federal Fluminense (UFF). Av. dos Trabalhadores, 420 - 27255-250 - Volta Redonda, RJ, Brasil. prrios@metal.eeimvr.uff.br

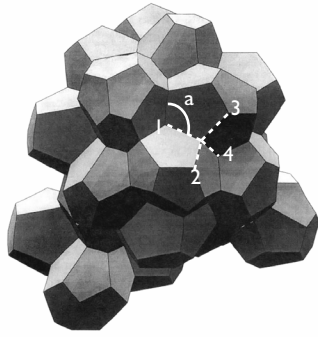


Figura 1. Rede policristalina.<sup>(1)</sup>

média da interface poderia ser obtida através de medidas realizadas em uma seção plana. Haroun e Budworth<sup>(2)</sup> usaram um método aproximado para medir a curvatura. Depois, Patterson e Liu<sup>(3)</sup> mediram a curvatura do contorno de grão em alumínio puro, e mais recentemente, Rios e Fonseca mediram em uma liga Al-1% massa Mn.<sup>(4)</sup> Esses trabalhos concentraram a curvatura do contorno de grão no contexto de ancoramento de partícula. DeHoff e Liu<sup>(5)</sup> mediram a integral da curvatura para examinar a relação entre o tamanho e a topologia do grão.

A estrutura cristalina pode ser analisada de três pontos de vista distintos. Sendo assim, a curvatura pode ser expressa como: curvatura média do contorno de grão,  $H_c$ ; curvatura média do grão,  $H_g$  e curvatura média das arestas do grão,  $H_a$ .<sup>(6,7)</sup> Essas curvaturas podem ser calculadas através das Fórmulas 1, 2 e 3, apresentadas a seguir.

$$H_c = \frac{2\pi T_A}{S_V} \quad (1)$$

Em que  $T_A$  é o número de pontos tangentes entre uma linha teste e um traço curvado do contorno de grão em uma seção por unidade de área.<sup>(3,6,7)</sup>  $S_V$  é a área interfacial por unidade de volume de grãos agregados.

$$H_g = \frac{2\pi N_A}{S_V} \quad (2)$$

Em que  $N_A$  é o número de grãos por unidade de área.

$$H_a = \frac{\pi P_A}{S_V} \quad (3)$$

Em que  $P_A$  é o número de pontos tripos por unidade de área.

É importante esclarecer que quando comparados os resultados presentes com os de outros autores,<sup>(3,5-7)</sup> deve-se considerar que nesse trabalho a curvatura média local,  $h$ , é definida como a soma das duas principais curvaturas, como sugerido por Taylor,<sup>(8)</sup>  $k_1$  e  $k_2$ . Portanto, as curvaturas médias acima são multiplicadas por um fator 2 quando comparadas às de outros autores.

Rios e Fonseca, em trabalhos anteriores, deduziram modelos geométricos simples.<sup>(9-11)</sup> Esses modelos relacionam cada curvatura com o comprimento médio das intersecções dos grãos,  $\lambda$ , como apresentado abaixo:

$$H_c = \frac{2}{3}\lambda^{-1} \quad (4)$$

$$H_g = \frac{8}{3}\lambda^{-1} \quad (5)$$

$$H_a = 2\lambda^{-1} \quad (6)$$

Esse trabalho tem como objetivo obter dados experimentais variados ao medir as três curvaturas que descrevem a microestrutura em materiais com estrutura cúbica de face centrada (liga Al-1% massa Mn) e em materiais com estrutura cúbica de corpo centrado (aço elétrico de grãos não orientados, aço microligado ao nióbio, aço livre de intersticiais, e ferro puro) com diferentes tipos de tratamento térmico e compará-los a modelos geométricos apresentados nas Equações 4, 5 e 6.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

O comprimento médio das intersecções dos grãos e as curvaturas ( $H_c$ ,  $H_g$  e  $H_a$ ) foram medidos em uma variedade de policristais metálicos: i) Uma liga Al-1% massa Mn de alta pureza, com o total de impureza menor que 40 ppm; ii) Fe puro, com uma composição (ppm em massa) de: 41 C; 940 Mn; 15 P; 20 S; 160 Si; 20 Al; 80 N; 10 Ti; 30 Cu; 100 Cr; 20 Mo; 10 Nb; 10 V; 4 B; e 165 O; iii) Aço microligado ao Nióbio, com uma composição (% em massa) de: 0,09 C; 1,04 Mn; 0,07 Si; 0,018 P; 0,004 S; 0,004 N; 0,039 Al; e 0,036 Nb; iv) Aço elétrico com grãos não orientados, com uma composição (% em massa) de: 0,004 C; 0,628 Mn; 0,58 Si; 0,097 P; 0,010 S; 0,017 Ni; 0,003 N; 0,20 Al; 0,009 Cu; e 0,02 Cr; e v) Aço livre de intersticiais (IF), com uma composição (% em massa) de: 0,004 C; 0,162 Mn; 0,005 Si; 0,01 P; 0,004 S; 0,002 N; 0,03 Al; e 0,094 Ti.

Para a liga Al-1% massa Mn, apresentada em trabalhos anteriores<sup>(4,9-11)</sup>, aqui o estudo é estendido através de medidas de amostras tratadas termicamente por 3.600s entre 490°C e 610°C em passos de 20°C. Essas amostras são chamadas “amostras isócronas” e nas legendas das Figuras na seqüência serão denominadas “Al-1% massa Mn (a)”. Amostras também foram produzidas por tratamento isotérmico a 610°C, 615°C, 625°C e 650°C por tempos variando de 3.600 s até 86.400 s. Essas amostras foram chamadas “amostras isotérmicas”

e nas legendas das Figuras na seqüência serão denominadas “Al-1% massa Mn (b)”. Amostras de Fe puro foram deformadas 80% por laminação, e tratadas termicamente a 600°C, 650°C, 700°C, 750°C, 800°C e 850°C por 1.800s. As amostras de aço microligado ao Nb, aço elétrico e aço IF foram recebidas depois de diversas condições de processamento desses materiais.

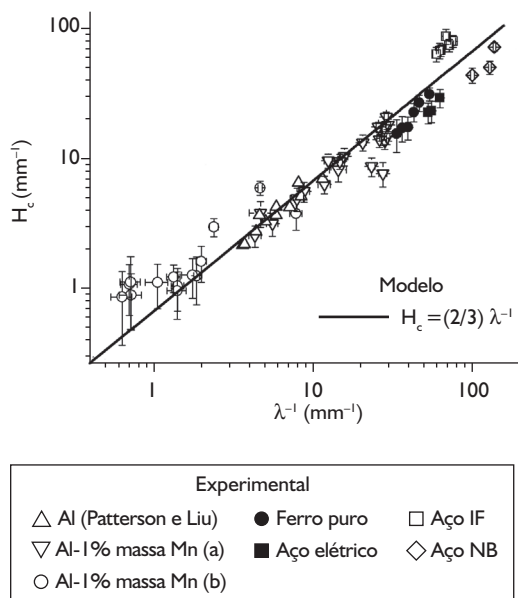
O comprimento médio das intersecções dos grãos,  $\lambda$ , e a área do contorno de grão por unidade de volume,  $S_v$ , foram medidos por técnicas metalográficas padrão.<sup>(12)</sup> A integral da curvatura do contorno de grão foi medida usando o método da tangente de DeHoff.<sup>(7,12)</sup> Foi medido o número de pontos tangentes entre uma linha teste e um traço curvado do contorno de grão em uma seção por unidade de área ( $T_A$ ), assim como  $N_A$  e  $P_A$ .<sup>(12)</sup> Descrição detalhada dos procedimentos usados para as medidas podem ser encontrados nos capítulos 4 e 5 do livro de Russ e DeHoff.<sup>(12)</sup>

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

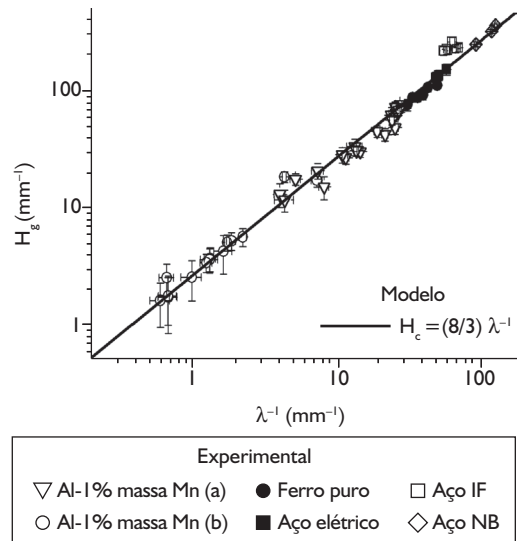
São apresentadas nas Figuras 2, 3 e 4, as comparações entre resultados obtidos das medidas de curvatura média do contorno do grão  $H_c$ , curvatura média do grão  $H_g$  e curvatura média das arestas do grão  $H_a$ , todos em função do inverso do comprimento médio dos interceptos,  $\lambda^{-1}$ . Usando escala logarítmica. Os erros experimentais são apresentados como barras de erros nas Figuras 2, 3 e 4.

A Figura 2,  $H_c \times \lambda^{-1}$ , compara a Equação 4 com os dados experimentais. As medidas experimentais de curvatura realizadas em alumínio puro por Patterson e Liu são também incluídas. O coeficiente de correlação, R, é igual a 0,856. O coeficiente de correlação encontrado é razoável e reflete a dispersão dos dados.

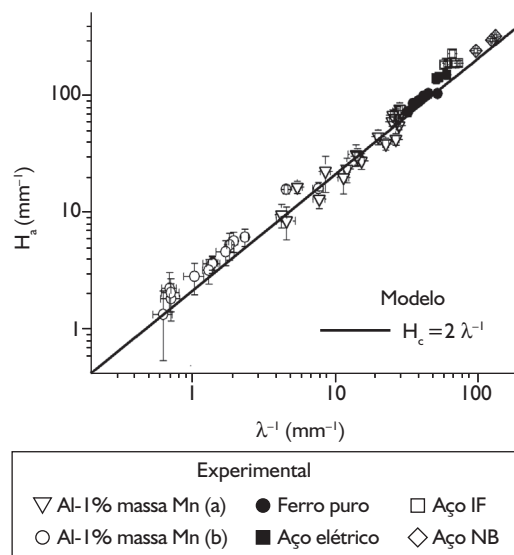
A Figura 3,  $H_g \times \lambda^{-1}$ , compara a Equação 5 com os dados experimentais. O coeficiente de correlação do modelo é 0,964. Esse coeficiente de correlação é significativamente maior que o obtido na Figura de  $H_c \times \lambda^{-1}$ . Uma inspeção visual das Figuras 2 e 3 confirma, uma melhor concordância dos dados na Figura 3 com a Equação 5 que o obtido na Figura 2.



**Figura 2.** Curvatura média do contorno de grão,  $H_c$ , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos,  $\lambda^{-1}$ . Os dados de Patterson e Liu em alumínio puro também são incluídos. A linha sólida representa a Equação 4.



**Figura 3.** Curvatura média dos grãos,  $H_g$ , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos,  $\lambda^{-1}$ . A linha sólida representa a Equação 5.



**Figura 4.** Curvatura média das arestas dos grãos,  $H_a$ , versus o inverso do comprimento médio das intersecções dos grãos,  $\lambda^{-1}$ . A linha sólida representa a Equação 6.

A Figura 4,  $H_a \times \lambda^{-1}$ , compara a Equação 6 com os dados experimentais. O coeficiente de correlação do modelo é 0,95. Novamente, o coeficiente de correlação é significativamente maior que o obtido na Figura de  $H_c \times \lambda^{-1}$ , e comparável ao obtido na Figura de  $H_g \times \lambda^{-1}$ . Uma inspeção visual das Figuras 2, 3 e 4 confirma uma melhor concordância dos dados na Figura 4 com a Equação 6 que o obtido na Figura 2 e uma concordância equivalente à apresentada na Figura 3.

Finalmente, observa-se que a concordância entre os modelos e os dados é melhor para a curvatura média dos grãos e curvatura média das arestas dos grãos, Figuras 3 e 4, em relação

a curvatura média dos contornos de grão (Figura 2). Isto pode significar que a curvatura média dos contornos de grão,  $H_c$ , é mais sensível a características específicas de agregados policristalinos, como a distribuição do tamanho de grão ou textura, comparada as curvaturas médias dos grãos,  $H_g$ , e das arestas dos grãos,  $H_a$ . Como a curvatura média dos contornos de grão é particularmente importante para o crescimento de grão, esse ponto permanece com um grande interesse.

Em resumo, pode-se dizer que os dados experimentais têm uma boa concordância com os modelos geométricos.

A razão pelas quais as medidas de diversos materiais possuam uma boa concordância com os modelos de Rios e Fonseca é discutido com referência aos requerimentos topológicos comuns que a rede policristalina está sujeita.

É claro que uma estrutura policristalina não é apenas um agregado de poliedros. As energias dos contornos de grão ou tensões superficiais impõem certos requerimentos topológicos na rede de poliedros. Essas condições de rede devem ser satisfeitas por todos os poliedros que a formam.

Na introdução foram descritas as regras de Plateau, que são demasiadamente restritivas, pois essas regras são aplicadas em materiais isotrópicos. Em um policristal metálico real, pode-se ter anisotropia. Portanto, nem todas as interfaces podem exibir exatamente a mesma energia livre interfacial por unidade de área, e assim os ângulos de equilíbrio podem se afastar dos ângulos ideais de Plateau.

Especificamente, mesmo que um policristal não cumprir exatamente as regras demasiadamente restritivas de Plateau, ainda assim, cada policristal deve obedecer a condições restritivas de topologia. Essas condições impõem que no encontro de três faces, o ângulo diedral médio seja de  $120^\circ$ , e que, no encontro de quatro linhas triplas, o ângulo tetraedral médio seja de  $109,47^\circ$ . Essas restrições topológicas foram primeiramente mencionadas por DeHoff<sup>(13)</sup> e generalizadas por Glicksman.<sup>(14)</sup>

## REFERÊNCIAS

- 1 AUGUSTO, F.P.M. **Medida das curvaturas do grão em metais**. 2006. 111 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) – Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2006.
- 2 HAROUN, N.A.; BUDWORTH, D.W. Modifications to the Zener formula for limitation of grain size. **Journal of Materials Science**, v. 3, n. 3, p. 326-8, May 1968.
- 3 PATTERSON, B.R.; LIU, Y. Relationship between grain boundary curvature and grain size. **Metallurgical Transactions**, v. 23A, n. 9, p. 2481-2, Sept. 1992.
- 4 RIOS, P.R.; FONSECA, G.S. Grain boundary curvature and particle pinning in an Al-1mass%Mn alloy. **Scripta Materialia**, v. 50, n. 11, p. 1373-7, June 2004.
- 5 DEHOFF, R.T.; LIU, G.Q. On the relation between grain size and grain topology. **Metallurgical Transactions**, v. 16A, n. 11, p. 2007-11, Nov. 1985.
- 6 CANH, J.W. The Significance of Average mean curvature and its determination by quantitative metallography. **Transactions of the Metallurgical Society of American Institute of Mining and Engineers**, v. 239, n. 5, p. 610-6, May 1967.

Os fortes requerimentos topológicos que o policristal está sujeito pode ser a razão do comportamento similar demonstrado nas Figuras 2, 3 e 4. Em outras palavras, a boa concordância de diversos materiais policristalinos com os modelos pode ser consequência dos requerimentos topológicos na rede policristalina.

## 4 CONCLUSÕES

Modelos geométricos relacionando a curvatura média do grão,  $H_g$ , da aresta do grão,  $H_a$ , e dos contornos de grão,  $H_c$ , com o comprimento médio das intersecções de policristais apresentaram uma boa concordância com dados abrangendo duas ordens de magnitude para uma variedade de policristais metálicos. Essa concordância pode ser uma consequência de requerimentos topológicos das redes policristalinas.

## Agradecimentos

Esse trabalho teve o suporte da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES. O primeiro autor agradece o Departamento de Matemática e Computação (DEMAC) da Faculdade de Tecnologia (FAT) da Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), onde esteve trabalhando no período dessa publicação como Professor Visitante. Agradecimento especial aos professores do DEMAC pelo apoio e confiança.

- 7 DEHOFF, R.T. The Quantitative estimation of mean surface curvature. **Transactions of the Metallurgical Society of American Institute of Mining and Engineers**, v. 239, n. 5, p. 617-21, May 1967.
- 8 TAYLOR, J.E. II – Mean curvature and weighted mean curvature. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 40, n. 7, p. 1475-85, July 1992.
- 9 RIOS, P.R.; FONSECA, G.S. Geometrical models for grain, grain boundary and grain edge average curvature in an Al-1 mass%Mn alloy. **Scripta Materialia**, v. 52, n. 9, p.893 -7, May 2005.
- 10 RIOS, P.R.; FONSECA, G.S. Grain boundary pinning by Al<sub>6</sub>Mn precipitates in an Al-1 wt%Mn alloy. **Scripta Materialia**, v. 50, n. 1, p. 71-5, Jan. 2004.
- 11 FONSECA, G.S.; RIOS, P.R. Estudo geral das curvaturas dos grãos e apresentação de modelos geométricos. In: CONGRESSO ANUAL DA ABM - INTERNACIONAL, 60., 2005, Belo Horizonte. **Anais...** São Paulo: ABM, 2005. 1 CD
- 12 RUSS, J.C.; DEHOFF, R.T. **Practical stereology**. 2. ed. New York: Kluwer Academic, 2000.
- 13 DEHOFF, R.T. The spherical image concept applied to grain structures. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 42, n. 8, p. 2633-43, Aug 1994
- 14 GLICKSMAN, M.E. Analysis of 3-D network structures. **Philosophical Magazine**, v. 85, n. 1, p. 3-31, Jan. 2005.

Recebido em: 30/07/2008

Aceito em: 18/02/2009

Proveniente de: CONGRESSO ANUAL DA ABM - INTERNACIONAL, 62., 2007, Vitória, ES. São Paulo: ABM, 2007.