

MIGRACIÓN ANISOTRÓPICA DE BORDE DE GRANO

PARTE I: TRATAMIENTO TEÓRICO

C. L. Di Prinzio, B. J. Gonzalez Kiegel, O. B. Nasello*

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba,
Medina Allende y Haya de la Torre, Ciudad Universitaria, (5000) Córdoba.

En este trabajo se presenta la ecuación general de movimiento correspondiente a borde de grano cuya energía superficial depende de la inclinación del mismo. Se particularizan las soluciones en el caso de bordes de grano 2-D y con configuración del tipo Sun-Bauer¹.

I. INTRODUCCIÓN

El estudio de la migración de bordes de grano en bicristales permite analizar en forma directa el movimiento de los límites de grano y conocer como varía el movimiento de los mismos en función de la mayoría de las variables involucradas en el proceso de crecimiento de grano. La ley fundamental que rige este proceso es la que relaciona la velocidad del límite de grano a lo largo de la normal a la superficie v , con la fuerza impulsora P . Esta es:

$$v = MP \quad (1)$$

donde M es la movilidad del borde de grano.

Todos los métodos experimentales desarrollados hasta el presente para realizar estos estudios, consideran que la fuerza que impulsa el movimiento de los límites de grano en materiales puros esta dada por:

$$P = \kappa\gamma \quad (2)$$

donde κ y γ son respectivamente la curvatura y la energía superficial del límite de grano. P dado por la Eq. (2) corresponde a la fuerza impulsora de capilaridad cuando γ es independiente de la inclinación del borde de grano. Entre estos métodos de destaca el desarrollado por Sun y Bauer¹, porque el mismo permite amplificar la fuerza real que impulsa el movimiento. El método de Sun y Bauer consiste en generar, utilizando las fuerzas de capilaridad, un borde de grano con forma hiperbólica, partiendo de un borde de grano inicial plano el cual forma un ángulo α con la superficie libre de la muestra (ver Fig. 1). Luego, durante el recocido isotérmico del bicristal el borde de grano se mueve preservando su forma de equilibrio cuasi-hiperbólico y el desplazamiento a del punto de contacto entre la superficie

libre y el borde de grano obedece a la ecuación:

$$a^2(t) = 2M\gamma f(\alpha)t + a^2(0) \quad (3)$$

donde $f(\alpha)$ es un factor de magnificación.

Es bien conocido, sin embargo, que la energía superficial del borde de grano depende de la desorientación de los cristales adyacentes y de la inclinación del mismo. Por ejemplo, Gleiter² encontró una notable influencia de la inclinación del borde de grano sobre la energía superficial en muestras de aluminio.

En este trabajo se desarrolla un análisis teórico de las ecuaciones de movimiento y sus soluciones para bordes de grano cuya energía superficial depende de la inclinación del mismo, y se analizan las soluciones de esta ecuación especialmente para la configuración inicial propuesta por Sun y Bauer.

II. ECUACIÓN DE MOVIMIENTO

Según Mullins⁵, en general la fuerza impulsora debida a capilaridad se obtiene de la expresión de la variación de la energía superficial total del límite de grano, representada por la siguiente expresión:

$$\delta \int \gamma ds = - \int P \delta \hat{n} ds = - \int \nabla_s \cdot \vec{\xi} \delta \hat{n} ds \quad (4)$$

donde $\delta \hat{n}$ es un desplazamiento algebraico normal al borde de grano y ds es el elemento de superficie del mismo. La expresión $\nabla_s \cdot \vec{\xi}$ es la divergencia superficial del vector $\vec{\xi}$, que de acuerdo a Cahn y Hoffman⁴ es:

$$\nabla_s \cdot \vec{\xi} = \gamma(\kappa_1^p + \kappa_2^p) + \left(\frac{\partial^2 \gamma}{\partial n_1^2} \kappa_1^p + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial n_2^2} \kappa_2^p \right) \quad (5)$$

* Miembro del CONICET

donde κ_1^p y κ_2^p representan las curvaturas principales de la superficie del borde de grano y dn_i ($i = 1, 2$) son las componentes de la variación del vector normal \vec{n} a lo largo de las direcciones tangentes \vec{t}_i ($i = 1, 2$). De acuerdo a la ecuación (4) se desprende que la fuerza impulsora esta dada por:

$$P = \nabla_s \cdot \vec{\xi} \quad (6)$$

Finalmente de Eq. (1), Eq. (5) y Eq. (6) se obtiene:

$$v = M \left(\gamma(\kappa_1^p + \kappa_2^p) + \left(\frac{\partial^2 \gamma}{\partial n_1^2} \kappa_1^p + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial n_2^2} \kappa_2^p \right) \right) \quad (7)$$

La Eq. (7) nos muestra que cuando γ depende de la inclinación del borde, la velocidad normal de un elemento del mismo depende de la energía superficial y su derivada segunda respecto a las variables geométricas que caracterizan la inclinación del borde. Ambos términos en esta expresión pueden ser comparables entre sí, y sólo cuando la energía del borde de grano es uniforme, la Eq. (7) se reduce a la ecuación comúnmente usada en los estudios de migración de límites de grano:

$$v = M\gamma(\kappa_1^p + \kappa_2^p) \quad (8)$$

En este trabajo nos limitaremos a resolver la Eq. (7) para los casos de bicristales con bordes de

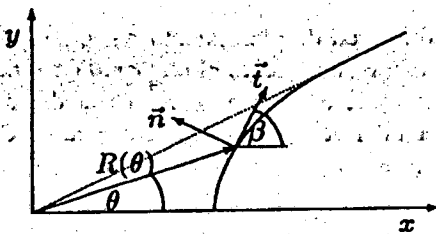
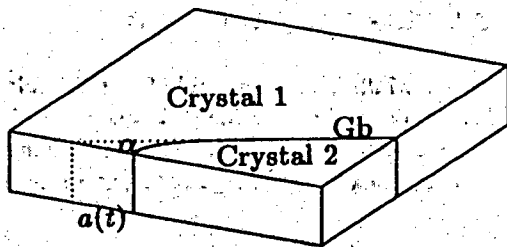


Fig. 1: Bicristal con configuración de tipo Sun y Bauer.

grano planos. Una representación geométrica de este tipo de bordes de grano está dada en la Fig. 1.

En estos casos, la curvatura del borde de grano y el término de la derivada segunda de la energía superficial pueden ser reemplazados mediante un adecuado cambio de variable por:

$$\frac{\partial \kappa_i^p}{\partial n_i} = -\frac{\partial \kappa_i^p}{\partial \beta} ; \quad \frac{\partial^2 \gamma}{\partial n_i^2} = \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \beta^2} \quad (9)$$

Por otro lado la velocidad normal de un borde de grano de un bicristal bidimensional, según Mullins³, está relacionada con la velocidad radial del mismo mediante la ecuación:

$$v = r \frac{\partial r}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial s} \quad (10)$$

Así, considerando Eq. (7), Eq. (9) y Eq. (10), podemos expresar la velocidad radial de un elemento de un borde de grano bidimensional, cuya energía superficial varía con la inclinación β del mismo, por medio de la expresión:

$$r \frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{\partial \beta}{\partial \theta} M \left[\gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \beta^2} \right] \quad (11)$$

Comparando esta expresión con la similar obtenida por Mullins³ para el caso $\gamma = cte$, se observa que cuando $\gamma \equiv \gamma(\beta)$ la ecuación de movimiento es la misma pero con una $M_{\gamma ef}$ dada por:

$$M_{\gamma ef} = M \left[\gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \beta^2} \right] \quad (12)$$

III. SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN DE MOVIMIENTO PARA CONFIGURACIONES DE TIPO SUN-BAUER

La posición radial r de un elemento del borde de grano varía en el espacio y tiempo según la Eq. (11). Esta ecuación puede resolverse si r es separado como una parte temporal T y otra espacial R , quedando $r(\theta, t) = R(\theta) T(t)$. Reemplazando en Eq. (11) y resolviendo se obtiene:

Teniendo en cuenta Eq. (14), Eq. (13) puede ser reescrita como:

$$r^2(\theta, t) = -2 \frac{\partial \beta}{\partial \theta} M\gamma_{ef} t + r^2(\theta, 0) \quad (15)$$

Esta ecuación da la posición radial r para cualquier elemento de borde de grano en función del tiempo, cuando la forma inicial del borde de grano es $r^2(\theta, 0)$. Notemos que para todo valor de θ y γ la relación entre r^2 vs. t es lineal.

En general, Eq. (14) no puede ser resuelta analíticamente debiendo encontrarse la solución a través de métodos numéricos. Esta relación es válida en general para todo borde de grano, y en particular puede aplicarse a bordes de grano que tienen la configuración tipo S-B. Según Mullins⁵ las curvas obtenidas por medio de la Eq. (14) son abiertas y no acotadas para $c > 0$, y son siempre acotadas pero no necesariamente abiertas, si el término con $M\gamma$ es mayor que cero y $c < 0$.

Para $\theta = 0$ el valor $r(0, t)$ es igual a la coordenada móvil del método de Sun-Bauer llamada a y satisface la ecuación:

$$a^2(t) = Bt + a^2(0) \quad (16)$$

donde definimos:

$$B = -2 \left. \frac{\partial \beta}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} M\gamma_{ef} \Big|_{\theta=0} \quad (17)$$

A partir de Eq. (16) se observa que si $M\gamma \equiv M\gamma(\beta)$, siguiendo el método de Sun y Bauer no se puede obtener el valor de $M\gamma$. En efecto, en general, el término $\partial^2 \gamma / \partial \beta^2$ no puede despreciarse y $\partial \beta / \partial \theta|_{\theta=0} \neq f(\alpha)$ ya que este depende de la forma del borde de grano la cual a su vez depende de $M\gamma_{ef}$. En estos casos en lugar de $M\gamma$ se podrá determinar $M\gamma_{ef}|_{\theta=0}$ pero para ello deberá determinarse $\partial \beta / \partial \theta|_{\theta=0}$. Debe notarse sin embargo, que la determinación experimental de este parámetro tendrá un error experimental grande ya que deberá hacerse a partir de una curva digitalizada. Por este motivo ahora presentaremos una forma alternativa de expresar la solución de la Eq. (16) la cual será más fácil de aplicar para analizar resultados experimentales. Integrando la Eq. (14), teniendo en cuenta que cuando θ varía entre $[0, \alpha]$ β varía entre $[\pi/2, \alpha]$, y reemplazando en Eq. (15) se obtiene:

$$r^2(\theta, t) = -2R^2(\theta) \frac{\int_{\pi/2}^{\alpha} M\gamma_{ef} d\beta}{\int_0^{\alpha} R^2(\theta) d\theta} t + r^2(\theta, 0) \quad (18)$$

Para $\theta = 0$ y energía del borde de grano uniforme entonces la Eq. (18) se reduce a la Eq. (3) y por lo tanto $f(\alpha)$ puede expresarse como:

$$f(\alpha) = (\pi/2 - \alpha) \frac{R_s^2(0)}{\int_0^{\alpha} R_s^2(\theta) d\theta} \quad (19)$$

donde $R_s(\theta)$ representa la forma adoptada por la configuración del tipo S-B. Para el caso general con $\theta = 0$ pero con la energía del borde de grano anisotrópica se pueden definir dos parámetros $F(\alpha, \gamma)$ y $\overline{M\gamma_{ef}}$ para reobtener una expresión para $a(t)$ similar a la dada por Eq. (3) quedando B de la manera siguiente:

$$B = 2 F(\alpha, \gamma) \overline{M\gamma_{ef}} \quad (20)$$

donde los parámetros $F(\alpha, \gamma)$ y $\overline{M\gamma_{ef}}$ están dados:

$$F(\alpha, \gamma) = (\pi/2 - \alpha) \frac{R^2(0)}{\int_0^{\alpha} R^2(\theta) d\theta} \quad (21)$$

$$\overline{M\gamma_{ef}} = \frac{\int_{\pi/2}^{\alpha} M\gamma_{ef} d\beta}{(\pi/2 - \alpha)} \quad (22)$$

En la Eq. (20) se observa claramente que cuando $M\gamma \equiv M\gamma(\beta)$ el factor de amplificación $F(\alpha, \gamma)$ se apartará de factor $f(\alpha)$ tanto como la forma de la curva $R(\theta)$ se aparte de la forma que se obtiene cuando $M\gamma \equiv cte$. $F(\alpha, \gamma)$ puede obtenerse experimentalmente digitalizando el borde de grano y evaluando el área bajo la misma, procedimiento que en general no acarrea muchos errores. Por lo cual siguiendo un procedimiento similar al método de S-B, si se mide experimentalmente $F(\alpha, \gamma)$, se puede obtener el valor medio de $\overline{M\gamma_{ef}}$ a lo largo del borde de grano el cual está definido en Eq. (22).

IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó la ecuación de movimiento de un límite de grano con energía superficial que depende de la inclinación. En esta ecuación se observa que la anisotropía de la energía superficial del borde del grano agrega un término en derivada segunda respecto de una variable geométrica. Este término puede asociarse a una segunda fuerza impulsora que tiende a minimizar la energía total no por disminución del área total sino por la reorientación del borde.

Respecto a las soluciones, se encontraron aquellas correspondientes a bordes de grano bidimensionales y con la configuración de S-B. Dos formas alternativas fueron presentadas para la posición radial del borde de grano. Ambas expresiones mues-

tran que cuando $M\gamma \equiv M\gamma(\beta)$, si se sigue el método S-B no se puede usar el factor de amplificación determinado por estos autores y evaluar la difusividad $M\gamma$ del borde de grano. En estos casos deberá siempre determinarse $F(\alpha, \gamma)$ y tenerse en cuenta que no se obtendrá $M\gamma$ sino el valor medio de $[M\gamma_{ef}]$ a lo largo del borde de grano.

REFERENCIAS

1. R. C. Sun and C. L. Bauer. Acta Met. Vol. 18, pp 635 (1970).
2. H. Geiter. Acta Met. Vol. 18, pp 23 (1970).
3. W.W. Mullins. J. Appl. Phys. Vol 59, 4, 341 (1986).
4. J. W. Cahn and D. W. Hoffman. Acta Met., Vol. 22, pp 1205 (1974).
5. W. W. Mullins. J. Appl. Phys. Vol. 27, 8, pp 900 (1956).