



II Encontro de Iniciação Científica e Tecnológica
II EnICT
ISSN: 2526-6772
IFSP – Câmpus Araraquara
26 e 27 de Outubro de 2017



SIMULAÇÃO DO ESTÁGIO INTERMEDIÁRIO DE SINTERIZAÇÃO DO $BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_{3-\delta}$

SUELLEN M. FERREIRA¹, HUYRA E. ARAUJO²

¹ Graduando de Engenharia Mecânica, Bolsista PIBIFSP, IFSP Campus Piracicaba, matias.f.suellen@gmail.com

² Doutor na área de Ciências e Engenharia dos Materiais, IFSP Campus Piracicaba, huyra_estevao@hotmail.com

Área de conhecimento (Tabela CNPq): Cerâmicos – 3.03.05.03-0

RESUMO: A modelagem e a simulação de processos tornaram-se grandes aliados dos processos produtivos da era atual. Um dos exemplos que pode ser citado é o do processo de sinterização, que ainda é pouco embasada em conhecimento científico e devido a isso, a produção de materiais através deste método é prejudicada quando é necessário o controle restrito das condições de processamento, como é o caso de alguns materiais cerâmicos. Avanços tecnológicos permitiram a criação de equipamentos e métodos que possibilitaram o desenvolvimento de modelos geométricos capazes de auxiliar e prever comportamentos assumidos em situações reais. Deste modo, busca-se neste trabalho a remontagem da etapa intermediária de sinterização do $BaCe_{0,9}Y_{0,1}O_{3-\delta}$ através de seu estudo e modelagem. A pesquisa é fundamentada nos pilares de revisão bibliográfica, análise de amostras, simulação e construção de modelos de microestruturas através do *software Surface*. Os resultados obtidos indicam a viabilidade de uso do programa para a realização de simulações das condições reais de sinterização, não só do estágio intermediário, mas também dos demais, porém ainda com dificuldades que devem ser sanadas através do entendimento do funcionamento dos parâmetros contidos no *software*.

PALAVRAS-CHAVE: condutores protônicos; GeoGebra; mecanismo de difusão; simulação computacional; *Surface Evolver*.

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, problemas econômicos e ambientais decorridos da crescente dependência de combustíveis fósseis como fonte primária de geração de energia têm provocado grande interesse em pesquisas voltadas a formas alternativas de produção de energia elétrica, com especial atenção para aquelas provenientes de fontes renováveis (AMADO et al, 2007).

A exemplo dessas fontes destacam-se as CCEOS (Células a Combustível de Óxido Sólido). O grande impasse em seu uso é a necessidade de redução de sua temperatura de operação, que por sua vez depende do desempenho do eletrólito sólido cerâmico que será utilizado. Todavia, o desenvolvimento de cerâmicas com propriedades adequadas a este tipo de aplicação depende principalmente do entendimento de uma etapa essencial, a de sinterização (ROHRER, 2012).

A sinterização é o processo onde um conjunto de partículas em contato mútuo, sob ação da temperatura, ganha resistência mecânica, adquire suas propriedades finais e densifica (BARSOUM, 1997). Válido ressaltar que, sua força motriz de operação é a redução da energia superficial.

Embora o processamento de materiais cerâmicos remeta aos primórdios da sociedade, a sinterização ainda é majoritariamente apoiada em conhecimento empírico de forma que, o entendimento dos mecanismos e variáveis de difusão atômica constituem uma lacuna do embasamento científico.

O processo de sinterização pode ser dividido em três partes, de forma que a etapa intermediária, como objeto de estudo deste trabalho é caracterizada pelo isolamento dos poros alterando assim sua distribuição cilíndrica entre os grãos para esferas isoladas nos pontos triplos e eventualmente no grão.

A evolução da microestrutura é acompanhada de alterações geométricas e por isso a utilização de modelos geométricos constitui em uma ferramenta poderosa para o mapeamento do processo.

Baseado nisto, este trabalho possui por objetivo a simulação e modelagem geométrica do estágio intermediário de sinterização através do *software Surface Evolver*.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Sinterização

A sinterização pode ser definida como um processo físico, que passa por etapa de ativação térmica, que faz com que um conjunto de partículas de determinado material adquira resistência mecânica. No caso específico das cerâmicas, a sinterização é utilizada como processo de conformação devido ao seu alto ponto de fusão.

A força motriz de tal processo é a redução de energia superficial livre do conjunto de partículas, que inicialmente estão em contato mútuo. Esta redução ocorre através da substituição da interface sólido/líquido pela interface sólido/sólido, sendo esta última caracterizada pelo desaparecimento da porosidade. O fechamento das porosidades gera um deslocamento do material para preencher os espaços vazios, sendo que tal movimento é o que indica o tipo de sinterização (BRITO, MEDEIROS, LOURENÇO, 2007).

O processo de sinterização pode ser dividido em três etapas que caracterizam seu desenvolvimento: inicial, intermediária e final. Estas etapas são mostradas na figura 1.

A fase inicial é caracterizada pela formação e crescimento dos pescoços e vai até o momento em que estes começam a sofrer interferência uns dos outros. A etapa intermediária vai deste ponto até o isolamento dos grãos e a fase final parte daí até o fechamento total das porosidades já isoladas na etapa anterior.

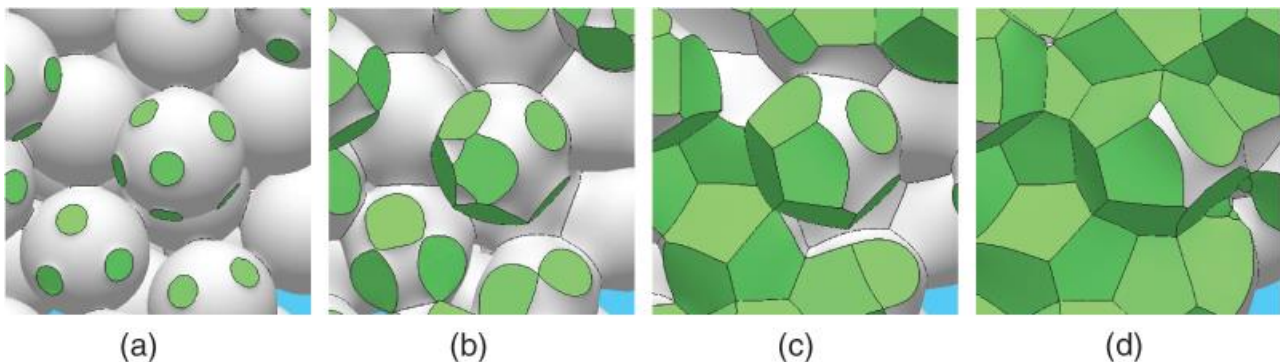


FIGURA 1. Etapas de sinterização. (a) Formação e crescimento de pescoços, (b) isolamento dos poros, (c) e (d) fechamento da porosidade isolada

Fonte: WAKAI, 2006

Surface Evolver

O *software Surface Evolver* é um programa interativo utilizado para o estudo de superfícies moldadas pela tensão superficial e outras energias, e sujeitas a várias restrições. Uma superfície é implementada como um complexo simplicial, ou seja, uma união de triângulos, sendo que o usuário define uma superfície inicial em um arquivo de dados (.txt). O Evolver evolui a superfície inicial em direção a energia mínima por um método de descida gradiente. O objetivo é encontrar uma superfície de energia mínima ou modelar o processo de evolução por curvatura média para energia de tensão superficial no contexto de variáveis e teoria de medidas geométricas.

A energia no Evolver pode ser uma combinação de tensão superficial, energia gravitacional, curvatura média quadrática, integrais de superfície definidas pelo usuário ou energias de nó. O Evolver pode lidar com topologia arbitrária (como se vê em conjuntos de bolhas de sabão reais), restrições de volume, restrições de limites, ângulos de contato de limites, curvatura média prescrita, integrandos cristalinos, gravidade e restrições expressas como integrais de superfície. A superfície pode estar em um espaço de dimensão arbitrária, que pode ter uma métrica Riemanniana (Soma de Riemann), e o espaço ambiente pode ser um espaço quociente sob uma ação grupal. O usuário pode modificar de forma interativa a superfície para alterar suas propriedades ou para manter a evolução em parâmetros desejáveis.

O Evolver foi escrito para superfícies de uma e duas dimensões, mas pode fazer superfícies dimensionais maiores com algumas restrições sobre os recursos disponíveis.

METODOLOGIA

Este projeto possui como segmentos a revisão literária, análise de amostras e simulação. A revisão da literatura constitui-se no estudo do processamento de materiais cerâmicos, bem como o processo de sinterização, os mecanismos de transporte de massa e as variáveis que compõe o sistema. A análise de amostras fundamenta-se em examinar micrografias de amostras preparadas através de polimento em pasta de diamante e levadas para análise em MEV (Microscópio Eletrônico de Varredura).

A simulação alicerça-se na tentativa de controlar as variáveis de influência na sinterização com o objetivo de obter as melhores combinações para alcançar as propriedades desejadas. Tais simulações foram realizadas no *software Surface Evolver*. Foi também utilizado o software livre GeoGebra para auxiliar na visualização espacial inicial das microestruturas que viriam a ser examinadas.

O *software Surface Evolver* apresenta-se com uma interface de linhas de comando com linguagem própria, com matriz em linguagem C, onde é possível a criação de rotinas de trabalho minimizando a necessidade do homem na interface homem-máquina durante a rotação do programa.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A figura 2 mostra o resultado obtido através de uma evolução realizada pelo software. A figura 2a mostra uma micrografia em MEV do pó cerâmico, onde o nível de aglomeração não permite a identificação individual de partículas. As áreas destacadas são, da esquerda para a direita, a fase inicial das representações simuladas (b) e (d) e seu respectivos resultados sinterizados (c) e (e).

Por sua vez, as figuras 2c e 2e, são micrografias também analisadas em MEV, porém, já com certo grau de sinterização, podendo assim, ser realizada a caracterização das microestruturas formadas. A figura 2e possui maior grau de sinterização que a figura 2c, as figuras 2b e 2d, mostram a reprodução realizada.

Em 2b, nota-se o começo da coalescência do grão, onde é mostrado o crescimento dos pescoços entre esferas que inicialmente não estavam em contato. A figura 2d representa uma microestrutura já facetada, que evoluiu e é fruto de muitas coalescências da figura anterior.

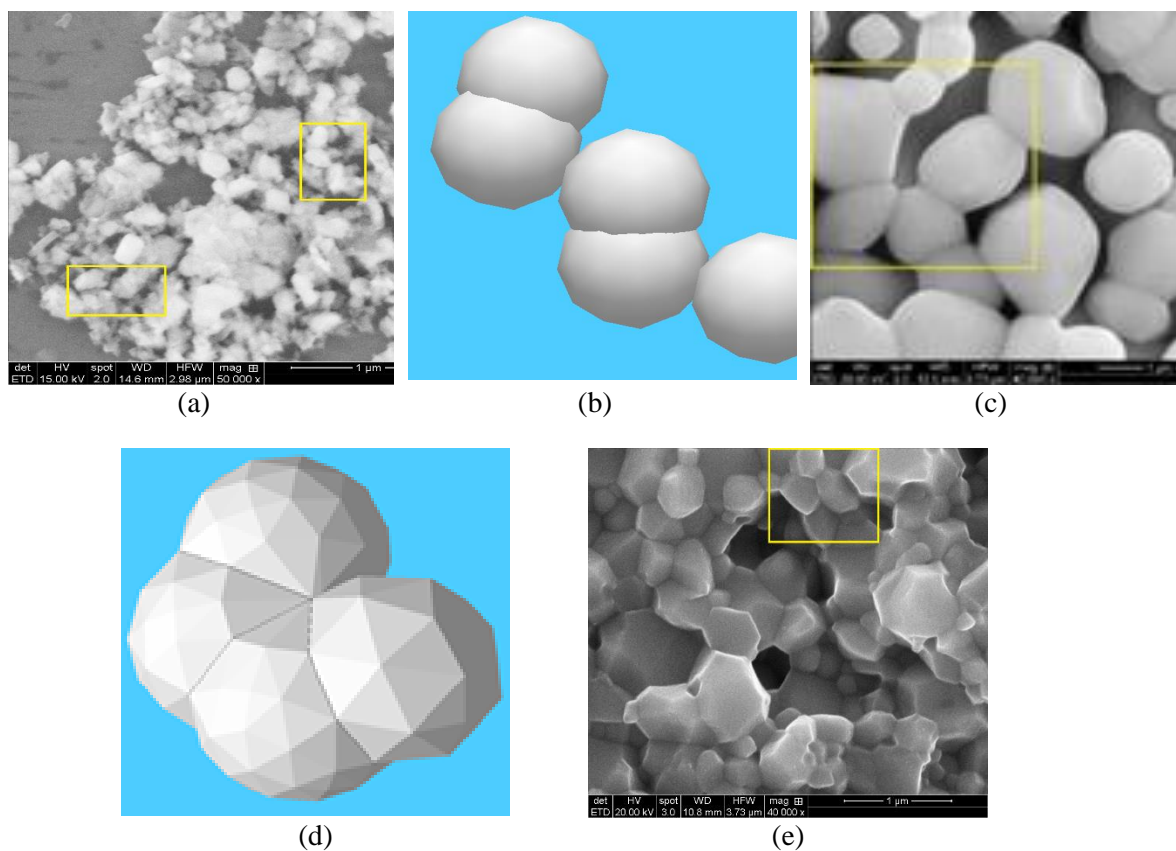


FIGURA 2. Evolução microestrutural na sinterização. (a) pó, (b) e (d) exemplo de evolução e (c) e (e) microestrutura sinterizada.

Fonte: Elaborada pelo autor

A micrografia em MEV 2e mostra o resultado do processo de sinterização. Os grãos estão totalmente facetados, porém ainda não ocorreu a sinterização completa do particulado.

A semelhança entre os pares de imagem 2b e 2c (estágio inicial), e 2d e 2e (estágio intermediário), retratam a eficácia do programa quanto a reprodução de parâmetros geométricos em diversos níveis de sinterização, contudo a caracterização dentro da simulação das interfaces ainda é um desafio.

Tal desafio, se dá pelo desconhecimento de alguns parâmetros pertencentes ao sistema que estão presentes de forma mais influente no estágio intermediário, a exemplo tem-se o parâmetro de difusão atômica.

Como o programa se baseia em linhas de comando é necessário que o programador insira dados básicos, como localização dos pontos, retas, faces e corpos componentes de cada partícula, assim é indispensável o uso de um *software* em que seja necessário não só a inserção de dados, mas também a visualização espacial destes.

O Geogebra foi o que se mostrou mais adequado as necessidades atuais, porém um *software* que importe essas informações a um documento de texto se mostraria mais eficiente e poderia facilmente substituí-lo.

CONCLUSÕES

Identificou-se a eficácia na remontagem de amostras sinterizadas, mas o programa ainda é um desafio quanto ao entendimento de fronteiras entre os grãos. Deste modo, o próximo passo do projeto é o estudo de como essas fronteiras ou restrições de movimento se aplicam a rotina de evolução. Outro ponto que se destinará a investigação é o de parâmetros como difusão, que apesar de já existente dentro das linhas de comando do programa carece de definições fornecidas pelo programador, como por exemplo, coeficiente de difusão.

REFERÊNCIAS

AMADO, R. S.; MALTA, L. F. B.; GARRIDO, F. M. S.; MEDEIRO, M. E. Pilhas a Combustível de Óxido Sólido: Materiais, Componentes e Configurações. **Química Nova**, 2007, [s.l.], v. 30, n. 1, p. 189-197.

BARSOUM, M. W. Fundamentals of Ceramics. **McGraw-Hill**, 1997.

BRITO, F. I. G.; MEDEIROS, K. F.; LOURENÇO, J. M. Um Estudo Teórico Sobre A Sinterização Na Metalurgia Do Pó. **Holos**, Natal, 2007, v. 3, p. 204-211.

ROHRER, G. S. Challenges in Ceramic Science: A report from the workshop on emerging research areas in ceramic science. **Journal of the American Ceramic Society**, 2012, v. 95, p. 3699-3712.

WAKAI, F. Modelling and Simulation of Elementary Processes in Ideal Sintering. **Journal of the American Ceramic Society**, 2006, v. 1484, p. 1471-1484.