



MmeMge32-012

Descrição do efeito de bloqueio de sítio em soluções sólidas intersticiais através da equação de Avrami

Pedroso, O.A.(1); Champion, Y.(2); Botta, W.J.(1); Zepon, G.(1);
(1) UFSCar; (2) UGA;

Soluções sólidas intersticiais estão presentes em diversos materiais de engenharia, sendo o carbono em aço o caso mais amplamente conhecido. Diversos fenômenos importantes para engenharia de materiais também dependem de soluções sólidas intersticiais tais como fragilização de hidrogênio em ligas metálicas, ou até mesmo armazenagem de hidrogênio em metais. Portanto, uma boa descrição termodinâmica de como ocorre a ocupação intersticial pelos átomos de soluto é fundamental para o desenvolvimento de materiais. Durante o processo de ocupação intersticial pode ocorrer o efeito de bloqueio de sítios (SBE, do inglês Site Blocking Effect), onde a ocupação de um sítio por um átomo impede os sítios vizinhos de serem ocupados. Diversos modelos termodinâmicos foram propostos para a descrição do SBE [1-6], entretanto, a consideração da sobreposição de sítios bloqueados por diferentes átomos não ocorre de forma clara. Portanto, um modelo para a descrição do SBE considerando a sobreposição de sítios bloqueados foi desenvolvido partindo da consideração que a ocupação intersticial, e a contagem de sítios bloqueados, seguem um processo de Poisson espacial, ou seja, ocorre aleatoriamente e independente das ocupações anteriores. Este processo se assemelha ao processo de transformação de fase por nucleação e crescimento descrita pela bem conhecida equação de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK). Desta forma, propusemos um modelo no qual a fração de sítios bloqueados também pode ser bem descrita através da equação de JMAK. O modelo proposto (denominado modelo JMAK) permite estimar o número de sítios bloqueados considerando o fenômeno de sobreposição de bloqueio de sítios de forma simples e direta. O modelo JMAK foi validado comparando os valores calculados de entropia configuracional valores obtidos por simulação numérica e com dados experimentais. Referencias [1] K. A. Moon, Thermodynamics of interstitial solid solutions with repulsive solute-solute interactions, *Trans. AIME* 227 (1963). [2] R. B. McLellan, T. L. Garrard, S. J. Horowitz, J. A. Sprague, A model for concentrated interstitial solid solutions—its application to solutions of carbon in gamma iron, *AIME MET SOC TRANS* 239 (4) (1967) 528–535. [3] W. A. Oates, J. A. Lambert, P. T. Gallagher, Monte carlo calculations of configurational entropies in interstitial solid solutions., *Trans. Met. Soc. AIME*, 245: 47-54(Jan. 1969). (1969). [4] G. Boureau, A simple method of calculation of the configurational entropy for interstitial solutions with short range repulsive interactions, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 42 (9) (1981) 743–748. [5] J. Garcés, The configurational entropy of mixing of interstitials solid solutions, *Applied Physics Letters* 96 (16) (2010) 161904. doi:<https://doi.org/10.1063/1.3400221>. [6] H. Ogawa, A statistical- mechanical method to evaluate hydrogen solubility in metal, *The Journal of Physical Chemistry C* 114 (5) (2010) 2134–2143.