

Processamento e Análise de Dados na Instalação XTMS: Correlacionando Dados Térmicos, Mecânicos, e de Difração de Raios X

Pesquisador responsável: Antonio Jose Ramirez Londono

Unidade: Grupo de Caracterização e Processamento de Metais – CPM

Laboratório Nacional de Nanotecnologia – CNPEM

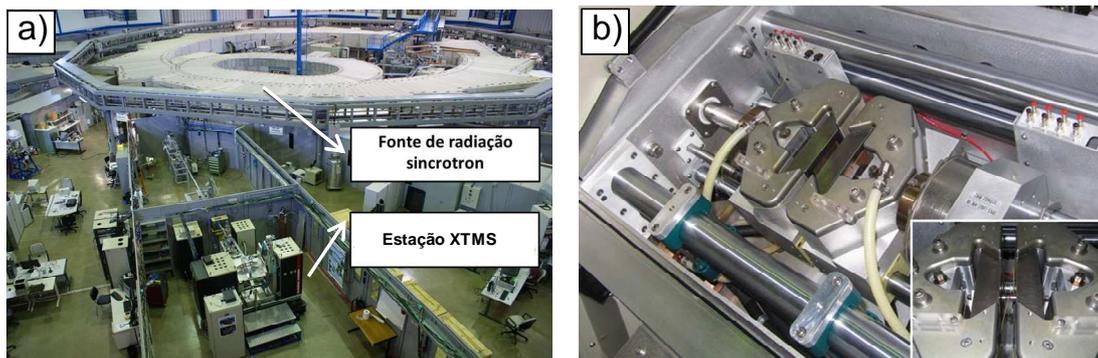
1 INTRODUÇÃO

A simulação física permite emular, mesmo de forma simplificada, o processo de manufatura e/ou a condição de aplicação do material, e, portanto da evolução microestrutural do material durante os mesmos, o que permite o melhor entendimento e otimização dos materiais e processos de manufatura. Esta evolução microestrutural pode consistir em mudanças morfológicas ou porcentuais, que podem ser quantificadas ex situ através da difração de raios-X convencional, ou in situ usando radiação síncrotron. Quando avançadas ferramentas de simulação física são utilizadas para a realização de experimentos controlados resolvidos no tempo, se abrem as portas para o estudo detalhado dos aspectos fundamentais da cinética da transformação de fase associadas às etapas de processamento dos materiais metálicos.

A realização de medidas de difração de raios-X (DRX) em tempo real usando uma fonte de radiação síncrotron, em amostras metálicas submetidas a condições termomecânicas controladas, é possível graças à estação experimental XTMS do LNNano, ubicada no LNLS-CNPEM.

A instalação XTMS consiste em um goniômetro construído em torno de um simulador termomecânico. O simulador age como porta amostras, e tem um sistema de posicionamento independente de alta precisão para garantir um adequado alinhamento. Mediante o uso desta instalação é possível reproduzir os ciclos termomecânicos de interesse, enquanto o elevado fluxo de raios-x de energia média,

Figura 1: Simulador termomecânico acoplado a uma fonte de radiação síncrotron na instalação XTMS do LNNano, usada para o estudo in situ de transformações de fase. a) Instalação, b) simulador termomecânico. Adaptado de [1].



gerados pela fonte sincrotron do LNSL torna possível o estudo resolvido no tempo por DRX. O simulador permite aplicar ciclos termo-mecânicos simultaneamente de maneira controlada e reproduzível. Além da informação cristalográfica fornecida pela DRX, a instalação fornece dados de tensão/deformação, força/deslocamento entre as garras, temperatura e dilatometria em função do tempo, permitindo a correlação entre as condições térmicas e mecânicas impostas à amostra e as transformações de fase evidenciadas pela difração. Para a detecção dos dados difração, a instalação conta com 2 detectores lineares (Mythen-2K) com 2560 canais, 0,3 ms de tempo de leitura, e um detector de área de alta resolução (Rayonix SX165), com tamanho útil de 165 mm de diâmetro e pixel de 39,5 μm . Na figura 1 detalha-se a instalação e o simulador termomecânico. Durante um experimento típico na XTMS, são coletados dados termomecânicos como temperatura, força, deformação e dilatometria pelo simulador; e de difração pelos detectores.

Estes dois blocos de dados têm uma marca temporal indicando o momento em que foram coletados. Isto significa que é possível correlacioná-los e sincronizá-los para efetuar a análise conjunta. Um exemplo de processamento de dados pode ser visto na figura 2, mostrando simultaneamente difração e informação termomecânica.

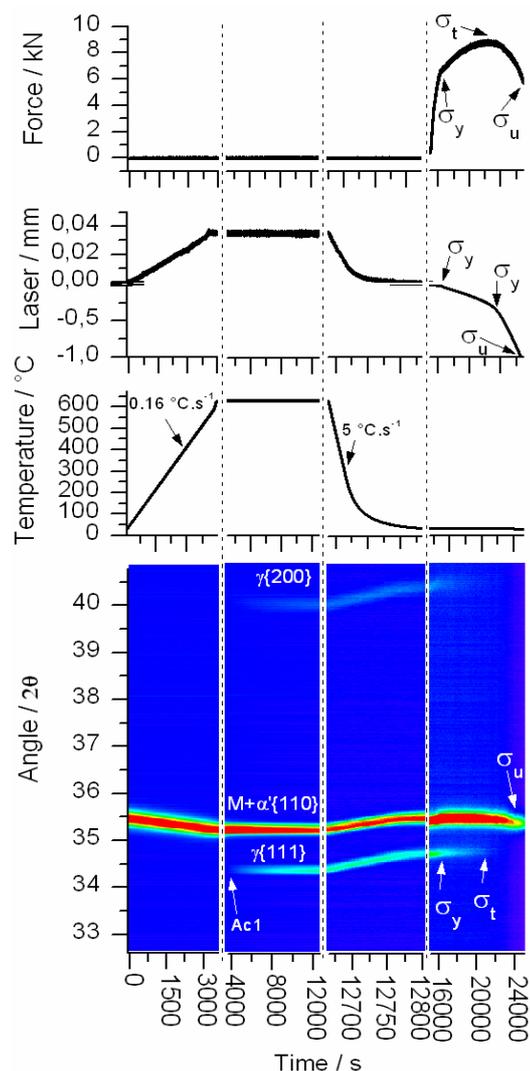
2 OBJETIVO

Participar no desenvolvimento de novas técnicas de processamento e análise de dados, tanto no desenvolvimento de softwares, quanto na dedução e implementação das correções e procedimentos matemáticos relevantes aos experimentos da instalação XTMS, trabalhando junto à equipe de desenvolvimento da instalação XTMS. Na parte de análise de dados, o candidato é convidado a se envolver com os projetos científicos realizados pela equipe do CPM, auxiliando na obtenção e discussão dos resultados experimentais.

3 METODOLOGIA

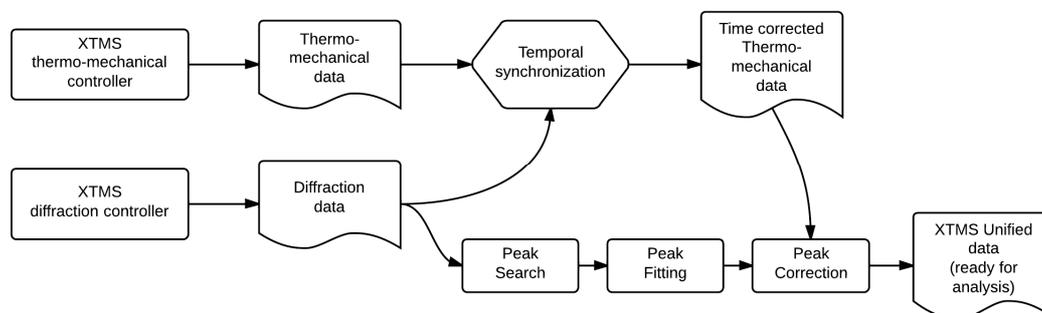
Os dados medidos na instalação XTMS são extraídos das estações de controle são obtidos em um estado não refinado, e não estão imediatamente prontos para a análise.

Figura 2: Exemplo de Medida na instalação XTMS, dados termomecânicos correlacionados com dados de difração.



Uma série de processamentos ainda é necessária antes que técnicas de análise possam ser aplicadas. Os dados se dividem em duas classes, os dados termomecânicos, e as aquisições de difração de raios X. O primeiro passo de processamento é sincronizar temporalmente os dados pertencentes a estas classes. Feito isso, a cada aquisição os picos são encontrados, seja de maneira automatizada ou baseado em informações fornecidas pelo usuário. Uma vez encontrados, uma dentre várias funções escolhida pelo usuário é ajustada nos picos usando o método de mínimos quadrados, e as informações do ajuste são exportadas e correlacionadas com dados termomecânicos. Baseado nos dados termomecânicos e em algumas outras informações de alinhamento, os picos têm sua intensidade, posição e largura corrigidas, e enfim, os dados estão prontos para análise. A Figura 3 mostra um fluxograma que ilustra como os dados são processados. Após este procedimento de processamento, vários procedimentos de análise podem ser aplicados para encontrar informações relevantes, tais como parâmetros de rede, composição em fases da amostra, microtensão, etc. Dada a enorme quantidade de dados produzida na instalação, estes procedimentos são aplicados de maneira automatizada, com pouca necessidade de intervenção do usuário. Uma série de plataformas diferentes é usada neste processo, como os programas Igor®, Matlab® e MS Excel®, assim como várias linguagens de programação.

Figura 3: Fluxograma mostrando a metodologia de processamento usada nos dados da instalação XTMS.



As metodologias e programas usados nestes procedimentos estão em constante estado de evolução e melhoramento. O candidato é convidado a auxiliar neste aperfeiçoamento, trabalhando conjuntamente com a equipe de desenvolvimento da instalação XTMS, participando na discussão, programação, dedução e implementação das estratégias de processamento.

4 REFERÊNCIAS

- [1] Ramirez. A.J. ; FARIA, G. ; WU, L ; ALONSO, T. C. ; ISAAC, A. ; PITON, J. ; NEUENSCHWANDER, RT . Keynote Lecture: Advanced Facility for Parallel Thermo-mechanical Simulation and Synchrotron X-ray Diffraction. (Apresentação de Trabalho/Congresso). Visual J-W 2012, Osaka, Japão, 2012.