

MODELO DE CAMPO DE FASES PARA A SOLIDIFICAÇÃO EQUIAXIAL DE METAL PURO EM ELEVADAS ANISOTROPIAS INTERFACIAIS E CINÉTICAS*

Rodrigo Ramalho Maciel¹
Marcelo Aquino Martorano²

Resumo

O modelo de campo de fases de interface fina para metal puro foi implementado para estudar o efeito de propriedades interfaciais com anisotropia relativamente elevada na solidificação dendrítica equiaxial. As equações desse modelo foram adimensionalizadas e solucionadas pelo método das diferenças finitas, em sua formulação explícita. Foi considerado o crescimento de uma dendrita equiaxial simétrica, permitindo a definição de um domínio de cálculo igual a um quarto do domínio total e suficientemente grande para ser considerado semi-infinito durante toda a simulação. Estudou-se o efeito das anisotropias na energia da interface sólido-líquido por unidade de área e no seu coeficiente cinético de crescimento. Quando não há anisotropia no coeficiente cinético, nota-se que a velocidade de crescimento da ponta do braço dendrítico aumenta e o seu raio de curvatura diminui com o aumento da anisotropia da energia interfacial, mas torna-se aproximadamente constante em anisotropias relativamente elevadas. Além disso, observam-se facetadas ao longo do braço dendrítico principal. Sem anisotropia da energia interfacial, a orientação preferencial de crescimento tornou-se clara apenas em elevadas anisotropias do coeficiente cinético de crescimento. Na presença dos dois tipos de anisotropias, o braço dendrítico primário sempre cresceu na direção preferencial, mas ramificações facetadas (braços secundários) foram observadas apenas em elevadas anisotropias da energia interfacial.

Palavras-chave: Campo de fases; anisotropia interfacial.

PHASE-FIELD MODEL IN EQUIAXIAL SOLIDIFICATION OF PURE METAL UNDER HIGH SURFACE ENERGY AND KINETIC COEFFICIENT ANISOTROPIES Abstract

The phase-field model with thin interface for pure metal was implemented to investigate the effects of relatively high anisotropy on interfacial properties during equiaxed solidification. The dimensionless form of the equations was solved using an explicit finite difference method. Symmetric, equiaxed dendritic growth was considered, allowing definition of a quarter of the actual domain. This domain was sufficiently large to be considered semi-infinite. The effects of the anisotropy in the surface energy per unit area of the solid-liquid interface and in its kinetic growth coefficient were investigated. Without anisotropy in the kinetic coefficient, the dendrite tip growth velocity increases and its curvature radius decreases with an increase in the interfacial area anisotropy. Furthermore, facets are observed along the primary dendrite arm. Without anisotropy in the interfacial energy, a preferred growth direction of the primary arm is clear only under relatively high anisotropy. The combined effects of anisotropy in both interfacial energy and kinetic growth coefficient results in a well-defined growth direction in all studied conditions. However, only under relatively high anisotropies, are faceted ramifications seen along the primary dendrite arm and at tip radius.

Keywords: Phase-field; interfacial anisotropy.

¹ *Doutorando, Departamento de Eng. Metalúrgica e de Materiais, USP, São Paulo, SP, Brasil.*

² *Professor, Departamento de Eng. Metalúrgica e de Materiais, USP, São Paulo, SP, Brasil.*

1 INTRODUÇÃO

No modelo clássico de solidificação, que tem sido estudado há mais de um século [1], a interface sólido-líquido é assumida como uma superfície matemática ideal (sem espessura) e os detalhes de sua forma e velocidade devem ser obtidos pela solução das equações deste modelo. Esta solução, que geralmente é obtida por métodos numéricos, requer o acompanhamento da posição de cada detalhe da interface, implicando em grandes complexidades. Por outro lado, o modelo de campo de fases (“phasefield”) aplicado à simulação da solidificação de metais não necessita do rastreamento explícito da interface sólido-líquido[2]. Nesse modelo, a interface é considerada difusa, com espessura finita, e pode ser calculada a partir do campo da chamada variável de fase. No modelo de campo de fases, atribui-se um valor para a variável de fase no sólido e outro no líquido, enquanto valores intermediários definem a região da interface. A construção de diversos modelos de campo de fases tem início na definição de um funcional de energia livre, que neste trabalho foi escrito como

$$F = \int_V \left[\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\phi|^2 - L \frac{T_m - T}{T_m} p(\phi) + Wg(\phi) \right] dV \quad (1)$$

onde F é a energia livre total do sistema composto pelas fases sólida e líquida, T representa a temperatura, ϕ é a variável de fase, L o calor latente por unidade de volume, T_m a temperatura de fusão, V é o volume do sistema, $g(\phi)$ é uma função que auxilia na criação de uma barreira energética entre as fases sólido e líquido, sendo que W é o máximo desta barreira, $p(\phi)$ é uma função que interpola a densidade de energia livre na região da interface difusa e ε é o coeficiente do termo que representa a chamada energia gradiente.

Observa-se experimentalmente que morfologias dendríticas facetadas surgem na presença de forte anisotropia do coeficiente cinético de crescimento e/ou da energia interfacial [3]. Estas duas características podem ser introduzidas no modelo de campo de fases a partir de diferentes funções matemáticas, que têm sido estudadas e discutidas na literatura. Em relação à anisotropia do coeficiente cinético, Uehara e Sekerka [4] propuseram duas funções onde são definidas a anisotropia e a faixa de orientação com valores elevados pela anisotropia. Miura [5] propôs uma função com comportamento semelhante ao proposto por Uehara e Sekerka [4], no entanto, com escolhas arbitrárias das direções de mínimo da função. Com a finalidade de simular a solidificação colunar facetada do silício, Linet *al.* [6] propôs uma modificação da função de Miller *et al.* [7] de forma a proporcionar um modelo bidimensional com elevadas anisotropias do coeficiente cinético entre as direções com índices de Müller $\langle 11 \rangle$ e $\langle 10 \rangle$. Também é necessária a escolha de uma função para a anisotropia da energia interfacial. Para crescimentos facetados, a variação da energia em função da orientação é relativamente elevada. No entanto, devido à restrição termodinâmica de que a rigidez da energia interfacial deve ser positiva, considerações especiais foram feitas [8]. Para manter positiva esta rigidez quando há elevada anisotropia, Eggleston *et al.* [9] propuseram uma regularização da função de cossenos usualmente implementada para descrever a energia interfacial em modelos de campo de fases. Debierre *et al.* [10] propuseram uma função com regiões suavizadas e facetadas que não necessita de uma regularização e evita o aparecimento de arestas no formato de equilíbrio da fase sólida. Linet *al.* [11] propuseram uma função de anisotropia que não necessita de regularização para simulações que utilizam elevadas anisotropias e possui forte semelhança à função proposta por Eggleston [9].

O objetivo do presente trabalho é realizar simulações do crescimento dendrítico equiaxial em um líquido super-resfriado utilizando o modelo do campo de fases de interface fina, proposto originalmente por Karma e Rappel [12], mas introduzindo os efeitos de elevada anisotropia tanto na energia da interface sólido-líquido como no seu coeficiente cinético de crescimento. Pretende-se analisar os efeitos da contribuição individual e combinada destas anisotropias na morfologia dendrítica e na velocidade de crescimento da ponta da dendrita.

2 Materiais e Métodos

Foi implementado um modelo matemático baseado no método do campo de fases com interface fina [13] para simular a solidificação dendrítica equiaxial em um líquido super-resfriado de um metal puro em um domínio bidimensional. Nesse modelo, a variável de fase assume valor $\phi = 1$ na região sólida, $\phi = -1$ no líquido e $-1 < \phi < 1$ na região da interface sólido-líquido difusa. Substituindo as funções de interpolação $g(\phi) = -\frac{\phi^2}{2} + \frac{\phi^4}{4}$ e $p(\phi) = \phi - \frac{2}{3}\phi^3 + \frac{\phi^5}{5}$ no funcional da Eq. (1) e utilizando-se o postulado $\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F}{\delta \phi}$ [14], onde M é a mobilidade e $\frac{\delta F}{\delta \phi}$ é a derivada variacional, obtém-se a equação utilizada para o cálculo do campo da variável de fase, ϕ . Esta equação está apresentada abaixo no formato adimensional

$$\frac{1}{M^*} \frac{\partial \phi}{\partial t^*} = \varepsilon_o^{*2} \nabla_a^{*2} \phi - a_1 \varepsilon_o^* T^* (1 - \phi^2)^2 + \phi (1 - \phi^2) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \nabla_a^{*2} \phi = \eta_Y \eta_Y' [2 \cos 2\theta \phi_{x^*y^*} + \sin 2\theta (\phi_{y^*y^*} - \phi_{x^*x^*})] + \eta_Y^2 \nabla^{*2} \phi \\ + \frac{1}{2} (\eta_Y \eta_Y')' [\nabla^{*2} \phi + \cos 2\theta (\phi_{y^*y^*} - \phi_{x^*x^*}) - 2 \sin 2\theta \phi_{x^*y^*}] \end{aligned} \quad (3)$$

onde $\eta_Y' = \frac{d\eta_Y}{d\theta}$, sendo η_Y a função de anisotropia da energia interfacial, e as variáveis adimensionais foram definidas como $x^* = \frac{x}{d_o}$, $y^* = \frac{y}{d_o}$, implicando em $\nabla^* = \frac{1}{d_o} \nabla$, $t^* = t \frac{\alpha}{d_o^2}$,

$d_o = \frac{a_1 \varepsilon_o \sqrt{W} C_p T_m}{L^2}$ (comprimento de capilaridade térmica) e C_p é o calor específico (por unidade de volume). Os parâmetros adimensionais foram definidos como $\varepsilon_o^* = \frac{\varepsilon_o}{d_o \sqrt{W}}$ e

$M^* = \frac{MW d_o^2}{\alpha}$, onde ε_o^* representa a espessura adimensional da interface difusa em relação ao comprimento de capilaridade (d_o) e M^* é a mobilidade adimensional. No modelo de interface fina ("thin interface"), proposto por Karma e Rappel [13], a mobilidade adimensional é calculada em função de outros parâmetros adimensionais como $\frac{1}{M^*} = \beta_o^* \varepsilon_o^{*2} \eta_Y(\theta) \eta_k(\theta) + a_1 a_2 \varepsilon_o^{*3} [\eta_Y(\theta)]^2$, onde $\beta_o^* = \frac{\alpha C_p}{\mu L d_o}$ representa o recíproco do coeficiente cinético adimensional de crescimento, μ é o coeficiente cinético de crescimento, cuja anisotropia se pretende estudar, α é a difusividade térmica e $a_1 = 0.8839$ e $a_2 = 0.6267$ são constantes específicas do modelo de interface fina. A equação da variável de fase foi solucionada em conjunto com a equação da conservação da energia apresentada abaixo

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \nabla^{*2} T^* + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t^*} \quad (4)$$

onde $T^* = (T - T_m) \frac{C_p}{L}$.

A partir das equações (2), (3) e (4) é possível simular a solidificação de um metal puro em concordância com o modelo clássico de solidificação desde que se adote uma espessura de interface difusa suficientemente fina. Porém, quando é necessário modelar a solidificação de morfologias facetadas resultantes da presença de elevadas anisotropias da energia interfacial e do coeficiente cinético de

crescimento, como é o caso da solidificação do silício [15], é necessário entender como estas anisotropias devem ser introduzidas nos parâmetros de entrada do modelo de campo de fases. A anisotropia da energia interfacial (por unidade de área), γ , pode ser introduzida no coeficiente da energia gradiente, ε , definido na equação (1), pois análises assintóticas mostraram que $\gamma = a_1 \varepsilon \sqrt{W}$ quando a espessura da interface difusa for suficientemente fina. Desta forma, pode-se adotar $\gamma(\theta) = a_1 \varepsilon(\theta) \sqrt{W}$, sendo $\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 \eta_\gamma(\theta)$, onde ε_0 é uma constante. No presente trabalho, para definir $\eta_\gamma(\theta)$ foi escolhida a função proposta por Eggleston *et al.* [9], apresentada abaixo

$$\eta_\gamma(\theta) = \begin{cases} 1 + s_\gamma \cos[j(\theta - \theta_o)] & \text{se } |\theta| > \theta_m \\ \frac{1 + s_\gamma \cos[j(\theta_m + \theta_o)]}{\cos(\theta_m)} \cos(\theta - \theta_o) & \text{se } |\theta| < \theta_m \end{cases} \quad (5)$$

onde θ_m é denominado arco de circunferência regularizado e é calculado por $(1 + s_\gamma \cos[j\theta_m]) \sin(\theta_m) - s_\gamma j \sin(j\theta_m) \cos(\theta_m) = 0$; s_γ representa a intensidade de anisotropia; j é o modo de anisotropia, adotado como 4 no presente trabalho; e θ_o é o ângulo do eixo de referência para definir a orientação da interface. Um procedimento conhecido como regularização foi realizado através da equação (5), por consequência da elevada intensidade de anisotropia. Especificamente quando $s_\gamma \geq \frac{1}{j^2 - 1}$, deve-se realizar a regularização. No caso de uma anisotropia octogonal no plano (001), como adotado no presente trabalho ($j = 4$), tem-se na necessidade da regularização quando a intensidade de anisotropia $s_\gamma \geq \frac{1}{15} = 0,067$. Finalmente, a anisotropia do coeficiente cinético de crescimento foi descrita pela função $\eta_k(\theta)$ proposta por Lin *et al.* [11] e apresentada abaixo

$$\eta_k = \left\{ 1 + \left[\frac{1 - \cos(4(\theta - \theta_o))}{2} \right]^{sk} \right\}^{nk} \quad (6)$$

onde a constante nk controla a amplitude da anisotropia e a constante sk controla a largura dos picos de aumento do coeficiente cinético.

As equações diferenciais (2), (3) e (4) foram discretizadas utilizando uma formulação explícita do método das diferenças finitas, com espaçamento de malha de pontos uniforme igual a $\Delta x^* = 0.4 \varepsilon_o^*$, adotando-se $\varepsilon_o^* = 5$, que representa a espessura adimensional da interface. Estes valores garantem um número suficiente de nós da malha no interior da região da interface [16]. O passo de tempo foi $\Delta t^* = \Delta x^{*2} / 6$, as dimensões do domínio foram de 5000x5000 (adimensional) e no seu contorno adotaram-se condições de gradiente nulo para a variável de fase e para a temperatura (adiabática). Como o problema especificado possui simetria, o domínio da solução numérica foi de um quarto do domínio que engloba completamente a dendrita equiaxial e o líquido super-resfriado ao seu redor. Como condição inicial, foi posicionado um quarto de círculo sólido de raio adimensional 5 no canto inferior esquerdo do domínio e o restante assumido líquido com temperatura adimensional uniforme $T^* = \Delta = -0,55$. O código computacional para resolução numérica das equações foi implementado em linguagem C++ e paralelizado para ser processado pelos núcleos processadores da placa de vídeo Nvidia GeForce GTX 1080Ti (GPU) utilizando-se a biblioteca CUDA [17]. Esta paralelização reduziu mais de uma ordem de grandeza os tempos totais de processamento. Os resultados foram obtidos em um computador pessoal com processador Core i7 6700 (Intel) com 16GB de memória RAM DDR4 e as simulações mais longas duraram cerca de 5 h.

3 Resultados e Discussões

O efeito das anisotropias da energia da interface sólido-líquido e do coeficiente cinético de crescimento desta interface sobre a morfologia do crescimento equiaxial está mostrado nas Figuras 1, 3 e 5. Em cada uma das imagens estão apresentados o campo de temperaturas no instante $t^*=2.5 \times 10^5$, mostrando um líquido super-resfriado em relação ao sólido, como esperado para esse tipo de crescimento. Além disso, as linhas pretas em cada figura representam uma curva de nível para $\phi = 0$, que será considerado como a posição da interface sólido-líquido. É possível observar em todas as figuras que a direção principal de crescimento equivale à direção de mínimo da rigidez da energia interfacial, que coincide com o máximo da energia interfacial, e/ou do mínimo no recíproco do coeficiente cinético adimensional (β^*).

Na Figura 1 nota-se o efeito isolado da intensidade de anisotropia da energia interfacial sobre a morfologia. Aumentou-se gradualmente a intensidade da anisotropia da energia interfacial, s_γ , mantendo anisotropia nula no coeficiente cinético ($\eta_k = 1$). Na Figura 1(f) está mostrado o gráfico polar da energia interfacial em função da orientação para os valores de anisotropia utilizados. Quando $s_\gamma > 0,067$, o procedimento de regularização foi conduzido, alterando o valor médio da energia interfacial. Sem anisotropia interfacial ($s_\gamma = 0$), não houve o aparecimento de braços (ramificações) primários ou secundários e o sólido cresceu com forma esférica (Figura 1(a)) até o final do período simulado. Segundo a teoria das perturbações, seriam esperadas o crescimento de protuberâncias quando o raio do sólido esférico ultrapassasse $R^*=22/\Delta$ [18], ou seja $R^*=40$ no presente caso, que é um valor muito menor do que o observado na Figura 1(a) ($R^* \approx 900$). Uma possível explicação para a discrepância é a falta de perturbações numéricas que poderiam crescer, mas este ponto deve ser examinado futuramente.

A sequência da Figura 1(a) até a Figura 1(e) mostra o efeito do aumento gradual da intensidade de anisotropia da energia interfacial até $s_\gamma = 0,25$, indicando o aparecimento de protuberâncias que cresceram em direções preferenciais sobre o núcleo originalmente esférico para qualquer valor de $s_\gamma \neq 0$. Desta forma, a introdução da anisotropia da energia interfacial parece facilitar a desestabilização da interface sólido-líquido. Em anisotropias consideradas fracas ($s_\gamma < 1/15 \approx 0,067$), não foi necessário a regularização proposta por Eggleston *et al.* [9] e observa-se uma redução de duas ordens de grandeza do raio de curvatura na ponta do braço primário (Figura 2), o que pode indicar uma tendência à formação de facetas que se encontrariam nesta região. Visualmente, no entanto, a morfologia não parece facetada. Para anisotropias consideradas fortes na energia interfacial ($s_\gamma \gtrsim 0,067$), a regularização foi utilizada e observa-se o aparecimento de ramificações (possivelmente futuros braços secundários) levemente facetadas ao longo do braço dendrítico primário. A redução do raio de curvatura na ponta do braço primário novamente ocorreu (Figura 2), mas agora em menor escala, e permaneceu aproximadamente constante para $s_\gamma \gtrsim 0,15$, causando um comportamento análogo na velocidade de crescimento. Este comportamento está possivelmente associado à redução da energia interfacial máxima causada pelo processo de regularização [19]. Existe uma correlação entre a diminuição do raio de curvatura na ponta do braço primário e o aumento da velocidade de crescimento desta ponta, o que pode ser explicado pela maior extração de calor latente que ocorre para

menores raios de curvatura. Logo, nota-se que a introdução de uma intensidade de anisotropia considerada forte ($s_\gamma \geq 1/15 \approx 0,067$) na energia interfacial resulta no aparecimento de morfologias dendríticas (ou seja, braços primários com ramificações) facetadas mesmo sem anisotropia no coeficiente cinético de crescimento. Nos valores reduzidos de s_γ , não há formação de dendrita, pois não há ramificações, formando o que poderia ser denominado de célula (crescimento celular) com uma tendência à formação de facetas indicada pela redução do raio de curvatura na ponta (Figura 2).

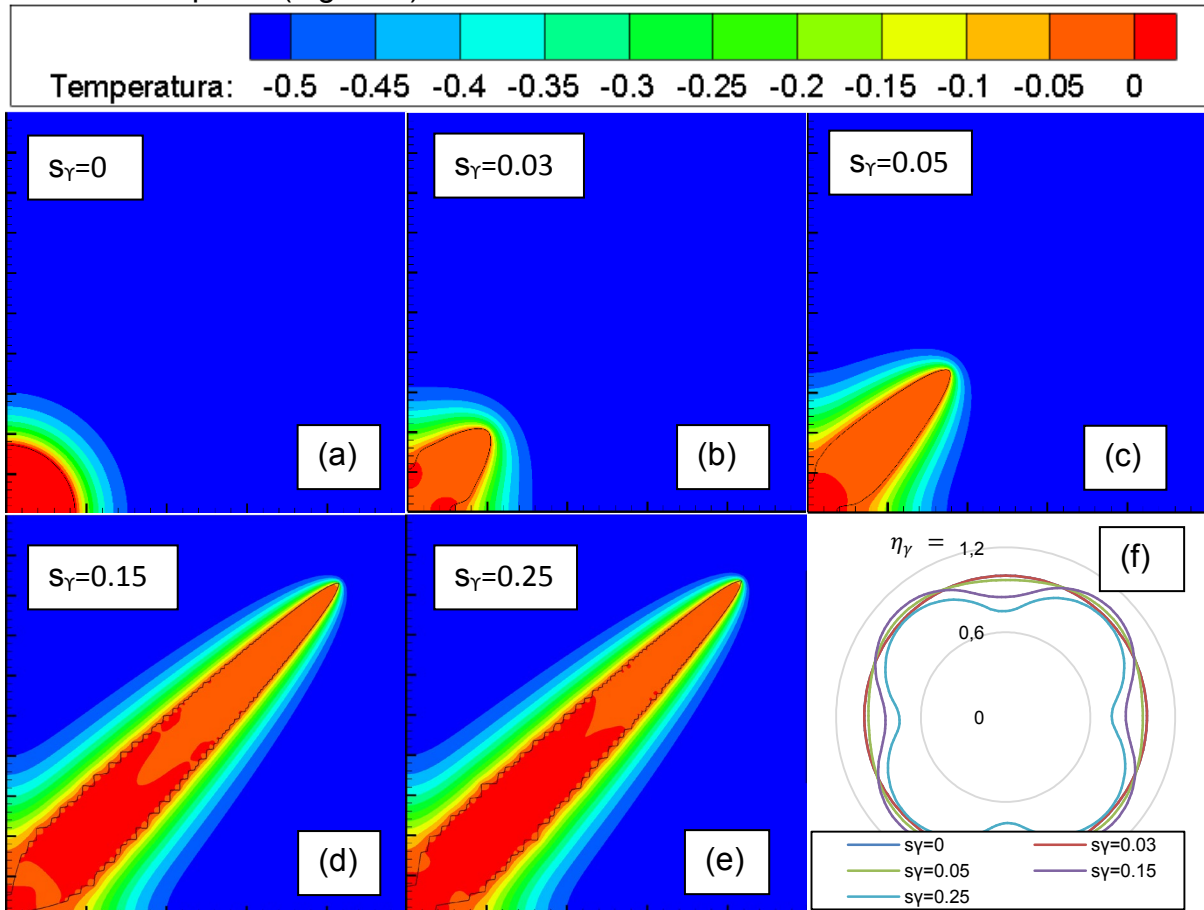


Figura 1 - Campo de temperaturas e interface sólido-líquido ($\phi=0$) em $t^* = 2,5 \cdot 10^5$. Domínio adimensional de 5000×5000 , $\Delta = -0.55$, $\varepsilon_o^* = 5$, $\beta_o^* = 3$ e $\eta_k = 1$.

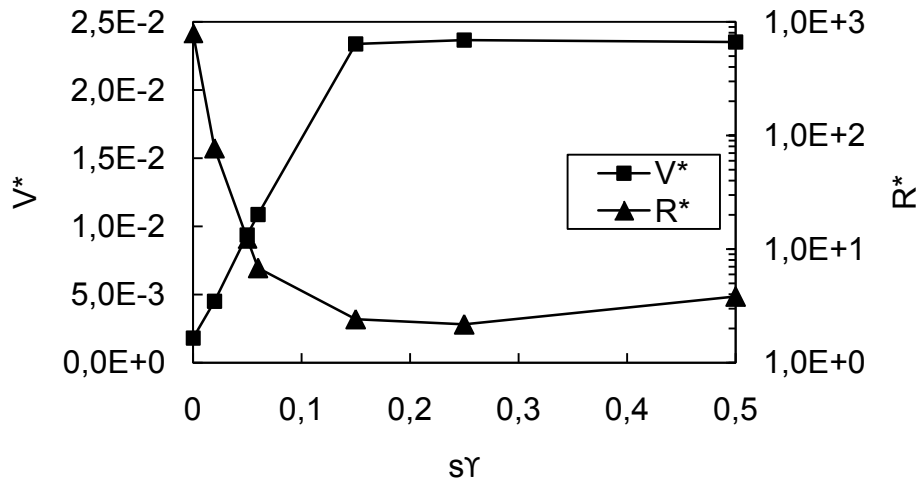


Figura 2– Velocidade ($V^*=Vd_0/\alpha$) e raio de curvatura adimensional ($R^*=R/d_0$) na ponta dendrítica em estado estacionário ($t^* = 2,5 \cdot 10^5$) em função da intensidade de anisotropia, s_γ , para $\Delta = -0,55$, $\varepsilon_0^* = 5$, $\beta_0^* = 3$ e $\eta_k = 1$.

Na Figura 3 está mostrado o efeito da modificação dos parâmetros que definem a anisotropia do coeficiente cinético de crescimento, mantendo agora a energia de interface isotrópica ($\eta_\gamma = 1$, ou seja, $s_\gamma = 0$). Na Figura 3 (a) foi apresentada novamente a Figura 1 (a) como referência, pois mostra o caso sem os dois tipos de anisotropia. Na Figura 3 (f) estão mostrados em coordenadas polares as curvas utilizadas para o recíproco do coeficiente cinético adimensional de crescimento (β^*) em função da orientação da interface. O valor de n_k determina o aumento de β^* na direção $\langle 11 \rangle$ em relação à direção $\langle 10 \rangle$. Portanto, quando a cinética de transferência de átomos através da interface sólido-líquido for limitante, o que ocorre para os valores de β^* relativamente pequenos utilizados no presente trabalho, a velocidade da interface será tanto maior quanto menor valor de β^* , o que pode ser observado nas morfologias da Figura 3. Para o menor valor de n_k não-nulo, ou seja $n_k = 0,3$ (Figura 3(b) e (c)), a maior diferença entre os valores de β^* (anisotropia) é aproximadamente 1,2. Neste caso ocorreu o crescimento de perturbações sobre a esfera inicial, porém a ponta do braço primário é instável sofrendo uma separação e proporcionando uma morfologia aparentemente irreal, com raio de curvatura negativo na direção $\langle 11 \rangle$ e sem uma direção preferencial de crescimento. Logo, o valor de n_k da ordem de 0,3 não parece resultar em uma morfologia realista. Esta desestabilização precoce observada na Figura 3(b) e (c) em relação à condição isotrópica (Figura 3 (a)) indica que, de forma análoga à anisotropia da energia interfacial, a anisotropia do coeficiente cinético também torna a interface sólido instável a perturbações. Aumentando-se o valor de n_k de 0,3 para 2 causa uma variação máxima de β^* bem maior, igual a 4, e agora se observa uma direção preferencial de crescimento bem definida do braço primário na direção $\langle 11 \rangle$, mostrando uma morfologia mais realista, como se pode observar na Figura 3(d) e (e). Entretanto, não ocorreu a formação de ramificações secundárias (dendritas) até o instante final de tempo de simulação. A Figura 4 mostra o raio de curvatura da ponta do braço primário é reduzida com o aumento de n_k até valores comparáveis os observados para $s_\gamma = 0,15$, o que pode indicar uma tendência à formação da morfologia facetada, porém, como não surgem ramificações secundárias, esta conclusão torna-se mais duvidosa.

Na Figura 4 é mostrado o efeito de n_k sobre a velocidade adimensional e raio de curvatura ponta do braço primário no tempo adimensional de $t^*=2.5 \times 10^5$. É possível observar um raio de ponta negativo para $n_k = 0,3$, indicando uma separação da ponta, que se torna novamente positivo com valores em torno de $n_k \geq 0.5$. O efeito de um aumento de s_k de 2 para 64, no entanto, foi menos expressivo na morfologia para $n_k = 2$, mas resultou em um maior desenvolvimento da separação da ponta dendrítica quando $n_k = 0,3$. Conclui-se, então, que uma morfologia realística quando a anisotropia está presente apenas no coeficiente cinético somente é possível para os valores de n_k mais elevados (~ 2) e que, mesmo assim, não induzem o aparecimento de ramificações secundárias, ou seja, a formação de dendritas até o tempo simulado.

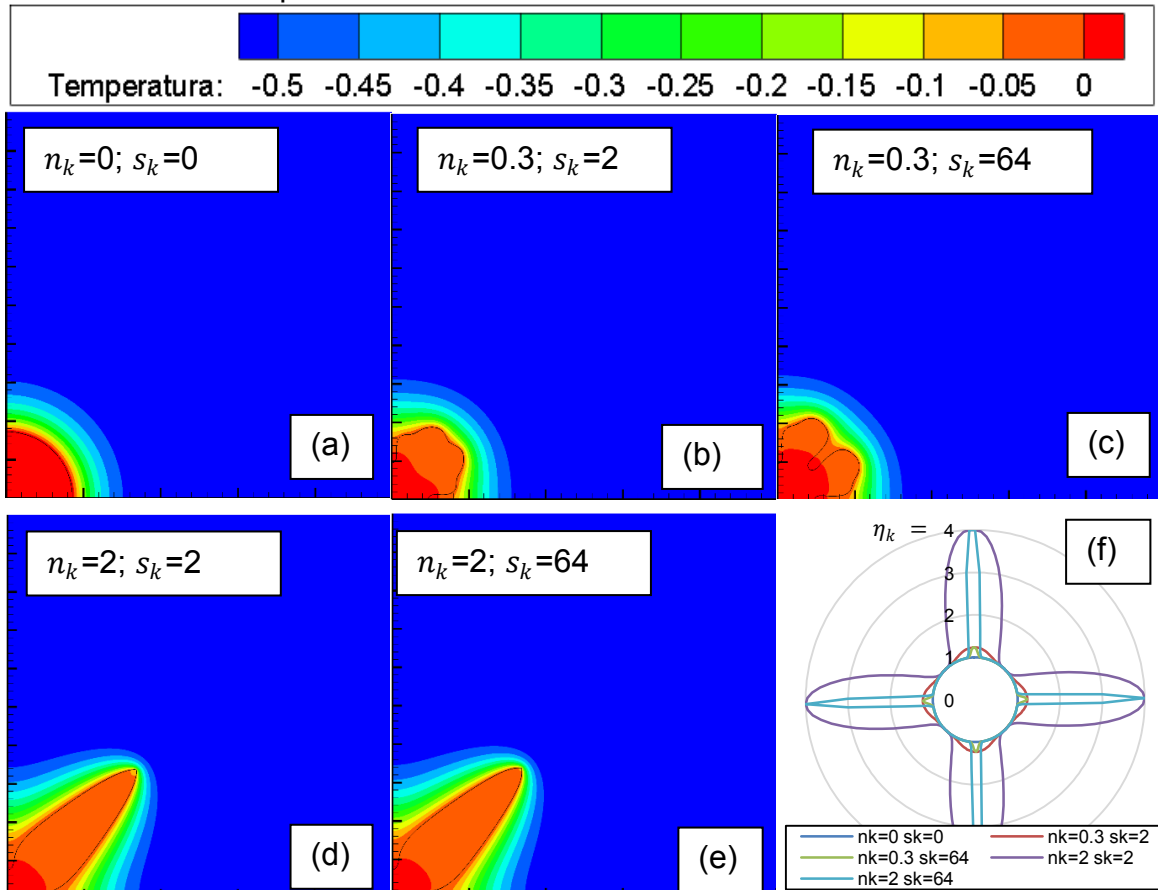


Figura 3 - Campo de temperaturas e interface sólido-líquido calculado em $t^* = 2.5 \times 10^5$ em um domínio de 5000×5000 para $\Delta = -0.55, \varepsilon_o^* = 5, \beta_o^* = 3, \eta_\gamma = 1$.

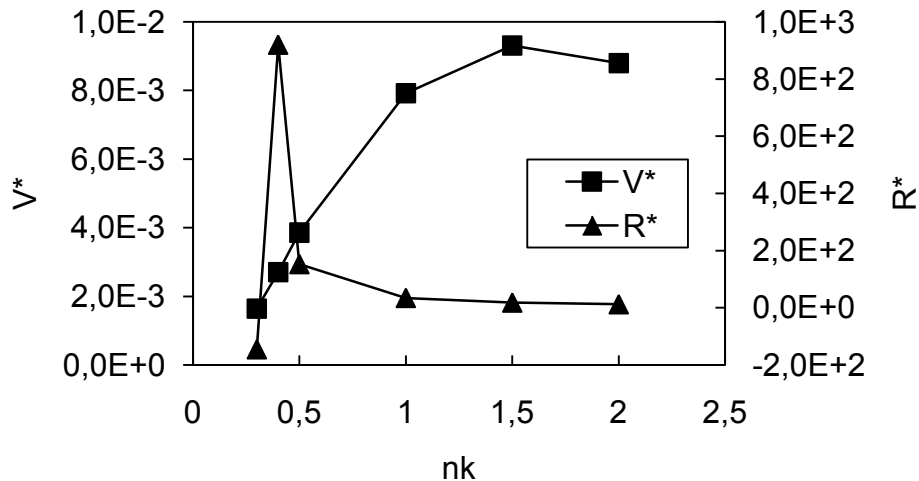


Figura 4 - Velocidade ($V^*=Vd_o/\alpha$) e raio de curvatura adimensional ($R^*=R/d_o$) na ponta dendrítica em estado estacionário ($t^* = 2,5 \cdot 10^5$) em função da intensidade de anisotropia, n_k para $\Delta = -0,55$, $\varepsilon_o^* = 5$, $\beta_o^* = 3$, $s_k = 2$ e $\eta_k = 1$.

Na Figura 5 são mostrados os gráficos em coordenadas polares das funções utilizadas no efeito combinado da anisotropia da energia interfacial e do recíproco do coeficiente cinético. Na Figura 6 estão os resultados das simulações nestas condições. Inicialmente está mostrada uma condição com os menores valores entre os termos estudados, $n_k=0,3$, $s_k=2$ e $s_\gamma=0,05$ (Figura 6(a)). Nota-se uma morfologia muito semelhante àquela da Figura 1 (c), indicando que o efeito da anisotropia do coeficiente cinético para $n_k=0,3$ (que controla a amplitude) tornou-se desprezível e a anisotropia da energia interfacial é preponderante. Com o aumento de n_k de 0,3 para 2, por outro lado, apesar de não ocorrerem variações significativas na morfologia, houve um decréscimo na velocidade de crescimento do braço primário, tornando esta morfologia semelhante àquela da Figura 3 (d), onde não há anisotropia da energia interfacial. A redução de velocidade pode ser observada na Figura 7. Estes resultados indicam que morfologias semelhantes e realistas, ou seja, apresentando uma ponta estável de braço dendrítico primário e com uma direção preferencial de crescimento como as da Figura 1 (c) e Figura 3 (d), podem ser obtidas tanto com anisotropias na energia interfacial como no coeficiente cinético de crescimento, quando valores adequados forem utilizados nos parâmetros que definem estas anisotropias. Índícios da morfologia facetada podem ser notados no raio de curvatura da ponta do braço em crescimento, que é reduzido significativamente (indicando o encontro de duas facetas) com o aumento da anisotropia (diferenças entre os valores máximos e mínimos de energia interfacial ou coeficiente cinético). O efeito na morfologia do aumento do parâmetro s_k de 2 para 64, que pode ser visto comparando-se a Figura 6 (b) e (c), é relativamente pequeno, mas a Figura 8 mostra que ocorre um aumento do raio de curvatura na ponta, o que pode indicar uma menor tendência à morfologia facetada. Este aumento de raio de curvatura causa o efeito esperado de uma diminuição da velocidade da ponta dendrítica devido à maior dificuldade de extração de calor. Note que estes valores adimensionais de raio de curvatura indicam valores de raios dimensionais uma ordem de grandeza maior que o comprimento de capilaridade e, portanto, o efeito de capilaridade em aumentar o super-resfriamento na ponta é desprezível.

O aumento da anisotropia da energia interfacial de $s_\gamma=0,05$ para 0,15, resultou no aparecimento de ramificações facetadas ao longo dos braços primários (Figura

6(d) e (e)), em um efeito semelhante ao observado nas Figuras 1(d) e (e), onde não existia anisotropia do coeficiente cinético. Logo, a anisotropia elevada da energia interfacial é a causadora das ramificações secundárias e da morfologia dendrítica. Estas ramificações provavelmente evoluiriam para braços secundários facetados, formando dendritas, em tempos de simulação mais longos. Além disso, quando uma menor anisotropia é utilizada no coeficiente cinético (Figura 6(d)), nota-se um aumento significativo de velocidade de crescimento em comparação ao menor valor de s_γ (Figura 6(a)). Este aumento está ilustrado na Figura 8 e provavelmente é decorrente da diminuição do raio de curvatura na ponta dendrítica, causada por uma tendência de formação de facetas que se encontram nesta ponta. Um aumento de n_k de 0,3 para 2 diminuiu significativamente a velocidade de crescimento dendrítico (Figuras 6 (d) e (e)), que é possivelmente causada por um aumento do raio de curvatura análogo ao mostrado na Figura 8 para $s_\gamma=0,05$. Pode-se concluir que qualitativamente é possível obter uma morfologia dendrítica facetada impondo anisotropia apenas na energia interfacial, considerando um coeficiente cinético isotrópico, e que a introdução também de anisotropia no coeficiente cinético não altera aspectos qualitativos da morfologia, mas pode reduzir a velocidade de crescimento. Simulações utilizando o método da dinâmica molecular indicam anisotropias da energia interfacial para o silício em torno de $s_\gamma=0,10$ [21] e no coeficiente cinético de $n_k=2,35$ [22], compatíveis com os valores que forneceram uma morfologia dendrítica facetada realista (Figura 6 (e)). Ainda assim, o formato das funções escolhidas para o coeficiente cinético e para a energia interfacial não está totalmente esclarecido para este material.

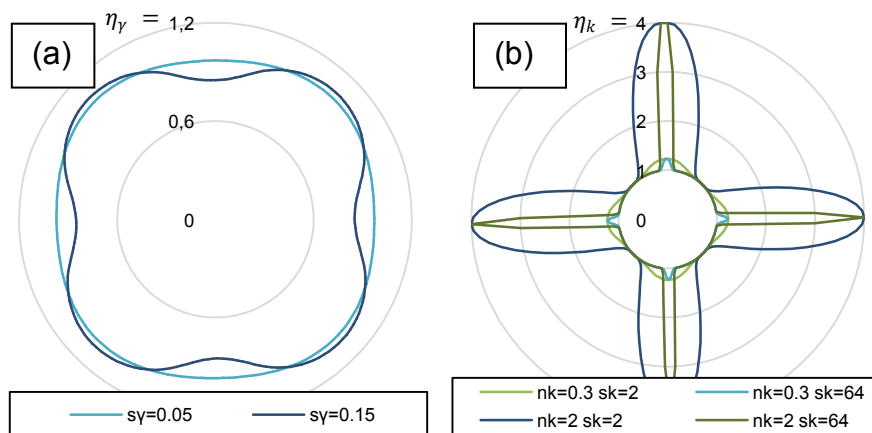


Figura 5 – Funções em coordenadas polares dos parâmetros de anisotropias implementadas em (a) intensidade da energia interfacial (s_γ); (b) intensidades da anisotropia do coeficiente cinético (n_k e s_k).

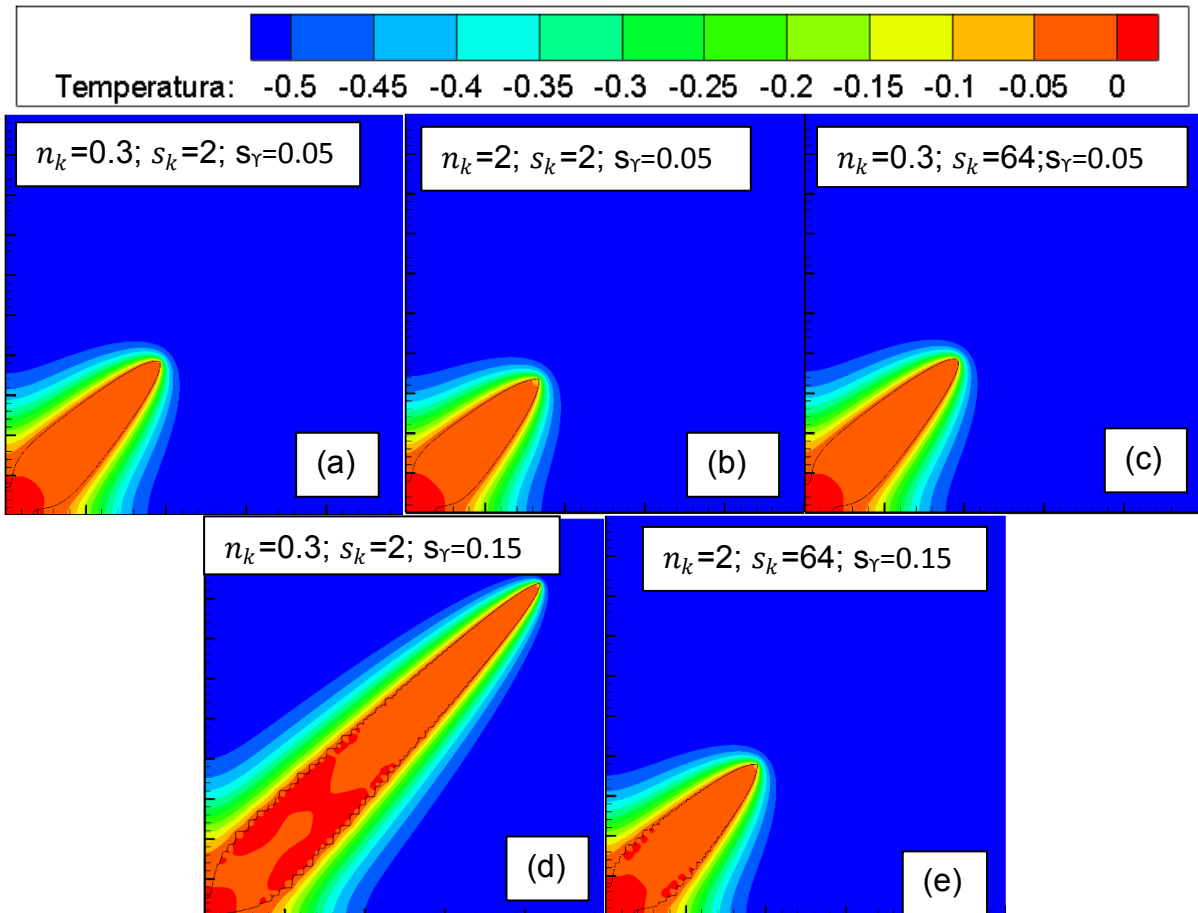


Figura 6 - Campo de temperaturas calculado no instante 2.5×10^5 considerando um domínio de 5000×5000 para espessura de interface difusa $\varepsilon_0^* = 5$. As linhas são curvas de nível para $\phi=0$. Condições de simulação: $\Delta = -0.55, \beta_0^* = 3$.

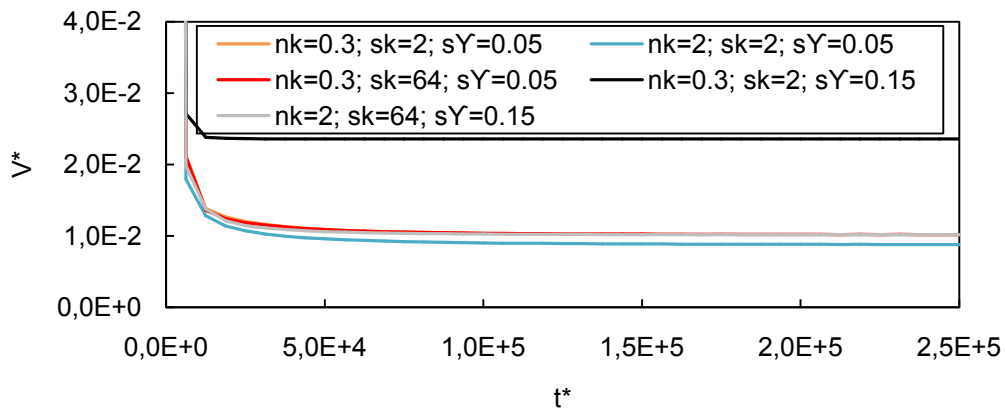


Figura 7 - Velocidade adimensional ($V^* = Vd_0/\alpha$) de crescimento da ponta dendrítica em função do tempo para diferentes condições de anisotropia, no instante 2.5×10^5 com $\Delta = -0.55, \beta_0^* = 3$ e $\varepsilon_0^* = 5$.

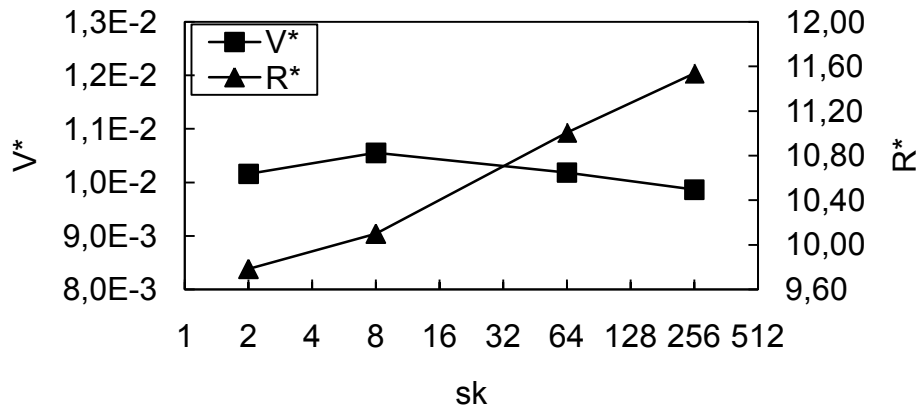


Figura 8 - Velocidade ($V^*=Vd_o/\alpha$) e raio de curvatura adimensional ($R^*=R/d_o$) na ponta dendrítica no regime estacionário em função da intensidade de anisotropia cinética, s_k , no instante 2.5×10^5 com $\Delta = -0.55$, $\beta_o^* = 3$, $s_\gamma = 0.05$ e $n_k = 2$.

4 CONCLUSÃO

Foram estudados o efeito da anisotropia da energia interfacial e do coeficiente cinético de crescimento sobre a solidificação equiaxial de um metal puro a partir de um modelo de campo de fases em domínio bidimensional. Foi possível observar em todos os casos estudados que a direção principal de crescimento equivale à direção de mínima rigidez da energia interfacial e/ou de mínimo recíproco do coeficiente cinético adimensional. Em anisotropias consideradas fracas na energia interfacial, observa-se uma redução de duas ordens de grandeza do raio de curvatura na ponta do braço primário, um aumento da sua velocidade de crescimento e uma morfologia que tende à facetada. Para anisotropias fortes na energia interfacial, observa-se o aparecimento de ramificações levemente facetadas, que parecem corresponder a braços secundários de dendrita. A redução do raio de curvatura e o aumento da velocidade na ponta do braço primário continua a ocorrer, mas em menor escala, e permanece aproximadamente constante para $s_\gamma \gtrsim 0,15$. Na presença apenas de anisotropia do coeficiente cinético de crescimento (sem anisotropia da energia interfacial), no menor valor de n_k não-nulo, ocorreu o crescimento de perturbações sobre o núcleo esférico inicial, porém a ponta do braço primário é instável e sofre separação, não correspondendo a uma morfologia realista, que é observada apenas em anisotropias mais elevadas. Mesmo neste caso não surgem ramificações secundárias até o final do tempo simulado. Estes resultados indicam que morfologias realistas com tendência à formação de facetas podem ser obtidas tanto com anisotropias na energia interfacial como no coeficiente cinético de crescimento, quando valores adequados forem utilizados nos parâmetros que definem estas anisotropias. No entanto, a anisotropia elevada da energia interfacial é a causadora das ramificações secundárias e da morfologia dendrítica. Portanto, pode-se concluir que qualitativamente é possível obter uma morfologia dendrítica facetada impondo anisotropia apenas na energia interfacial, considerando um coeficiente cinético isotrópico, e que a introdução também de anisotropia no coeficiente cinético não altera significativamente esta morfologia, mas pode reduzir a velocidade de crescimento.

Agradecimentos

Agradecemos à CAPES e ao CNPq (311206/2014-0) pelas bolsas concedidas.

REFERÊNCIAS

- [1] J. Crank, *Free and Moving Boundary Problems*, 2nd ed. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [2] T. Takaki, "Phase-field Modeling and Simulations of Dendrite Growth," *ISIJ Int.*, vol. 54, no. 2, pp. 437–

- 444, 2014.
- [3] W. Kurz and D. J. Fisher, *Fundamentals of Solidification*, 4th ed. CRC Press, 1998.
- [4] T. Uehara and R. F. Sekerka, "Phase field simulations of faceted growth for strong anisotropy of kinetic coefficient," *J. Cryst. Growth*, vol. 254, no. 1–2, pp. 251–261, Jun. 2003.
- [5] H. Miura, "Anisotropy function of kinetic coefficient for phase-field simulations: Reproduction of kinetic Wulff shape with arbitrary face angles," *J. Cryst. Growth*, vol. 367, pp. 8–17, 2013.
- [6] H. K. Lin, H. Y. Chen, and C. W. Lan, "Phase field modeling of facet formation during directional solidification of silicon film," *J. Cryst. Growth*, vol. 385, pp. 134–139, 2014.
- [7] W. Miller, N. Abrosimov, I. Rasin, and D. Borissova, "Cellular growth of single crystals," *J. Cryst. Growth*, vol. 310, no. 7–9, pp. 1405–1409, 2008.
- [8] C. Herring, "The use of classical macroscopic concepts in surface energy problems," in *Structure and Properties of Solid Surfaces*, 1st ed., R. Gomer and C. S. Smith, Eds. Chicago: University of Chicago Press, 1953, pp. 5–81.
- [9] J. J. Eggleston, G. B. McFadden, and P. W. Voorhees, "A phase-field model for highly anisotropic interfacial energy," *Phys. D Nonlinear Phenom.*, vol. 150, no. 1–2, pp. 91–103, Mar. 2001.
- [10] J. M. Debierre, A. Karma, F. Celestini, and R. Guérin, "Phase-field approach for faceted solidification," *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 68, no. 4 1, pp. 416041–4160413, 2003.
- [11] H. K. Lin, C. C. Chen, and C. W. Lan, "A simple anisotropic surface free energy function for three-dimensional phase field modeling of multi-crystalline crystal growth," *J. Cryst. Growth*, vol. 362, no. 1, pp. 62–65, Jan. 2013.
- [12] A. Karma and W.-J. Rappel, "Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics," *Phys. Rev. E*, vol. 53, no. 4, pp. R3017–R3020, Apr. 1996.
- [13] A. Karma and W.-J. Rappel, "Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions," *Phys. Rev. E*, vol. 57, no. 4, pp. 4323–4349, Apr. 1998.
- [14] S. M. Allen and J. W. Cahn, "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening," *Acta Metall.*, vol. 27, no. 6, pp. 1085–1095, Jun. 1979.
- [15] K. Fujiwara, "Crystal growth behaviors of silicon during melt growth processes," *Int. J. Photoenergy*, vol. 2012, 2012.
- [16] N. Moelans, B. Blanpain, and P. Wollants, "An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution," *Calphad*, vol. 32, no. 2, pp. 268–294, Jun. 2008.
- [17] Nvidia, "CUDA Toolkit Documentation," 2018. [Online]. Available: <http://docs.nvidia.com/cuda/>. [Accessed: 08-Apr-2018].
- [18] W. W. Mullins and R. F. Sekerka, "Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow," *J. Appl. Phys.*, vol. 34, no. 2, pp. 323–329, 1963.
- [19] S. G. Kim and W. T. Kim, "Phase field modeling of dendritic growth with high anisotropy," *J. Cryst. Growth*, vol. 275, no. 1–2, pp. 355–360, Feb. 2005.
- [20] A. M. Mullis, "A study of kinetically limited dendritic growth at high undercooling using phase-field techniques," *Acta Mater.*, vol. 51, no. 7, pp. 1959–1969, Apr. 2003.
- [21] P. A. Apte and X. C. Zeng, "Anisotropy of crystal-melt interfacial free energy of silicon by simulation," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, no. 22, p. 221903, Jun. 2008.
- [22] D. Buta, M. Asta, and J. J. Hoyt, "Kinetic coefficient of steps at the Si(111) crystal-melt interface from molecular dynamics simulations," *J. Chem. Phys.*, vol. 127, no. 7, p. 074703, Aug. 2007.