







Aplicación del método de campo de fases en la formación de dendritas Application of phase-field method to the dendrite formation

V.M. López-Hirata ^{a,*}, C.R. Escamilla-Illescas ^a, F. Vázquez-Maldonado ^a, S.S. Bautista-Fuentes ^a, K.P. Ornelas-Espinosa ^a, M.L. Saucedo-Muñoz ^a

^a Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, 07300, CDMX, México.

Resumen

En el presente trabajo se aplicó el método de campo de fases a la solidificación de metales puros, haciendo énfasis en el crecimiento de cristales dendríticos. La formulación propuesta por Kobayashi se empleó para analizar los diferentes parámetros que afectan el proceso de solidificación. Para simular la evolución de la microestructura dendrítica, se usó un código en FORTRAN, en el cual, las ecuaciones diferenciales parciales del modelo se resolvieron numéricamente por el Método Explícito de Diferencias Finitas para generar archivos de datos, que posteriormente se graficaron y se usaron para crear secuencias de la evolución dendrítica. Los resultados de la simulación mostraron la evolución de cristales dendríticos en metales con simetría cúbica y hexagonal, el efecto del calor latente de solidificación y la magnitud de anisotropía sobre la formación de dendritas. Al incrementar el valor de calor latente adimensional se observó una reducción en la velocidad de crecimiento de los cristales.

Palabras Clave: Solidificación, dendritas, método de campo de fases, metales puros.

Abstract

In the present work, the phase-field method was applied to the solidification of pure metals, emphasizing the crystal growth of dendrites. Kobayashi's formulation was used to analyze the effect of different parameters on the solidification process. A FORTRAN code was used for the dendrite simulation, and the explicit finite difference method was employed to solve the partial differential equations. The simulation results showed the dendrite evolution for metal with cubic and hexagonal symmetries, as well as the effect of solidification latent heat and anisotropy on the dendrite formation. The increase in the latent heat caused a reduction in the growth rate of crystals.

Keywords: Solidification, dendrites, phase-field method, pure metals.

1. Introducción

Las principales razones para utilizar la fundición son el amplio rango de propiedades físicas y mecánicas cubierto por aleaciones fundidas, la obtención de un producto con poca necesidad de acabado superficial, la versatilidad del proceso con respecto al peso y la forma del componente, que puede ser desde gramos hasta toneladas y formas elaboradas que no pueden ser obtenidas por otros procesos, así como un costo competitivo de los productos obtenidos.

El proceso de solidificación es una parte inherente de los procesos de fundición, y durante esta se genera la estructura de colada de la pieza fundida. Puesto que diversas piezas se usan sin tratamientos térmicos o conformado posterior, las propiedades mecánicas de estas, que son consecuencia directa de su microestructura, deben ser controladas durante el proceso de solidificación (Stefanescu, 2009).

Los cristales dendríticos o dendritas son estructuras de no-equilibrio que persisten a lo largo del proceso de solidificación y que están presentes en todas las piezas

*Autor para la correspondencia: vmlopezh@ipn.mx (Victor Manuel López-Hirata)

Correo electrónico: criscilllescas@gmail.com (Cristóbal Ricardo Escamilla-Illescas), fvazquezm1302@alumno.ipn.mx (Fernando Vázquez-Maldonado), sbautistaf1000@alumno.ipn.mx (Sebastián Bautista-Fuentes), kornelase1600@alumno.ipn.mx (Karla Paola Ornelas-Espinosa), msaucedom@ipn.mx (Maribel Leticia Saucedo-Muñoz).

fundidas. Estas consisten en cristales individuales ramificados, que presentan morfologías con direccionalidad cristalográfica, como brazos o ramas primarias, secundarias o terciarias que guardan relaciones angulares especiales entre ellas: los brazos primarios de una dendrita en un sistema cúbico se desarrollan en la dirección $\langle 100 \rangle$, con los brazos secundarios y terciarios desarrollándose en dirección ortogonal al brazo anterior.

Las dendritas son de gran importancia en materiales fundidos debido a que establecen la textura de solidificación y tamaño de grano en la pieza fundida, factores de influencia en las propiedades mecánicas y procesamiento posteriores al vaciado (Glicksman, 2001). Por ello es de gran importancia modelar la formación y evolución de esta microestructura.

Actualmente el Método de Campo de Fases es una de las técnicas más efectivas para modelar la evolución microestructural. La principal característica de los modelos de campo de fases es el carácter difuso de la intercara entre dos fases, razón por la cual se llaman también ‘modelos de intercara difusa’. La intercara se describe por una transición continua, en espacio x , de la variable de campo de fases $\phi(x, t)$ entre dos estados (Ingo, 2009).

El presente trabajo tiene el propósito de aplicar el Método de Campo de Fases al crecimiento de cristales dendríticos en un metal puro, usando la formulación propuesta por Kobayashi (Kobayashi, 1993) para analizar los diferentes parámetros que afectan el proceso de solidificación.

2. Metodología numérica

2.1. Formulación de Kobayashi

La formulación propuesta por Kobayashi (Kobayashi, 1993) consiste en un modelo de campo de fases para simular la formación de estructuras dendríticas en metales puros, formadas según el balance de la tensión superficial y la fuerza motriz termodinámica, sobreenfriamiento, tomando en cuenta la anisotropía de energía interfacial, que afecta drásticamente la forma de los cristales.

Al simular la solidificación de metales puros, se considera que la velocidad de crecimiento de los cristales está limitada sólo por el proceso de extracción de calor de la intercara, que mantiene la temperatura interfacial debajo de la temperatura de equilibrio.

El modelo incluye dos variables: un campo de fases $\phi(x, t)$ y un campo de temperaturas $T(x, t)$. La variable de campo de fases $\phi(x, t)$ es un parámetro de orden. En la posición x y el tiempo t , $\phi = 0$ indica la existencia de fase líquida y $\phi = 1$ indica la existencia de fase sólida. La intercara sólido/líquido se expresa por una transición suave de los valores entre 0 y 1.

Se considera que la energía libre es del tipo Ginzburg-Landau:

$$G(\phi, m) = \int \frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla \phi|^2 + F(\phi, m) dx \quad (1)$$

donde ε es un parámetro que determina el espesor de la capa y la movilidad de la intercara.

La anisotropía se incluye en el modelo al asumir que ε depende de la dirección del vector normal externo en la intercara (representado por $-\nabla \phi$). Así, la Ec. (1) se modifica:

$$G(\phi, m) = \int \frac{1}{2} \varepsilon (-\nabla \phi)^2 |\nabla \phi|^2 + F(\phi, m) dx \quad (2)$$

donde el parámetro δ se refiere a la magnitud de anisotropía, j al número de simetría de anisotropía y θ es un ángulo entre el vector normal externo en la intercara y una dirección determinada. El valor de $(\theta - \theta_0)$ se asigna a cada valor de $\nabla \phi$.

Se considera que la energía libre $F(\phi, m)$ reproduce una función potencial de doble pozo, donde un pozo representa la fase líquida y otro la fase sólida, que se expresa matemáticamente como:

$$F(\phi, m) = \frac{1}{4} \phi^4 - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} m\right) \phi^3 + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} m\right) \phi^2 \quad (3)$$

donde m representa la fuerza motriz para la solidificación y su valor absoluto es menor a 0.5 (Kobayashi, 1993).

La ecuación diferencial parcial de Allen-Cahn (Allen et al, 1979) a resolver es:

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\partial G}{\partial \phi} \quad (4)$$

donde τ es una constante positiva que fija la escala temporal. Al sustituir la Ec. (3) en la Ec. (2) y el resultado en la Ec. (4), se obtiene la siguiente ecuación diferencial, que representa la evolución de la intercara y es una de las ecuaciones a resolver en el modelo:

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \nabla \cdot (\varepsilon^2 \nabla \phi) + \phi(1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right) \quad (5)$$

donde ε' es la primera derivada de ε con respecto a θ . La fuerza motriz m se define como:

$$m(T) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right) \text{atan}\{\gamma(T_e - T)\} \quad (6)$$

donde α es una constante positiva menor a 1, requisito para que se cumpla la condición previamente mencionada de $|m| < 0.5$ en todos los valores de T , γ es un parámetro adimensional y T_e y T son las temperaturas de equilibrio y enfriamiento, respectivamente.

La ecuación para la temperatura adimensional T como una función del tiempo adimensional t , que es la segunda ecuación para resolver en el modelo, se deriva de la ley de la conservación de la energía y se expresa como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + \kappa \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (7)$$

donde κ es el calor latente adimensional. La temperatura T varía entre 0 y 1, que corresponden a las temperaturas de enfriamiento y equilibrio, respectivamente. Las soluciones a las Ecs. (5) y (7) producen resultados equivalentes (Kobayashi, 1993).

2.2. Programa de cómputo

Para simular la evolución de la microestructura dendrítica, se usó un código en FORTRAN llamado “Dendrite.f95”, en el cual, las Ecuaciones (5) y (7) se resolvieron simultáneamente en dos dimensiones usando el Método Explícito de Diferencias Finitas utilizando una malla de 301 x 301 nodos.

Las etapas de distancia Δx y de tiempo Δt elegidas fueron 0.03 unidades de distancia y 2×10^{-4} unidades de tiempo, respectivamente. Los valores seleccionados para los

parámetros restantes en las distintas simulaciones se resumen en la tabla 1.

Tabla 1: Parámetros de la formulación de Kobayashi usados durante las simulaciones

Parámetro	Valor
$\bar{\epsilon}$	0.01
δ	0.00, 0.02, 0.05, 0.08
j	0.0, 4.0, 6.0
m	1.0
α	0.9
γ	10.0
τ	0.0003
κ	1.0, 1.5, 1.8, 2.2

3. Resultados y Discusión

3.1. Simulación de acuerdo con la simetría

La figura 1 muestra las simulaciones donde el calor latente adimensional, κ , es unitario. Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 1 muestran la evolución de un cristal poligonal simulado bajo condiciones de simetría de anisotropía perfecta e isotropía cristalina, que presenta geometría casi circular.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 1 muestran la evolución de un cristal poligonal simulado bajo condiciones de simetría de anisotropía perfecta y baja anisotropía cristalina, $\delta = 0.020$. A pesar del valor de anisotropía distinto a cero con el que se simuló, no se aprecian cambios en la geometría del cristal.

Es evidente que ambos cristales presentan altas velocidades de crecimiento, ya que a un tiempo de 0.32, casi todo el líquido disponible ha solidificado.

La figura 2 muestra las simulaciones donde el calor latente adimensional tiene un valor alto, $\kappa = 1.8$.

Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 2 muestran la evolución de un cristal simulado bajo condiciones de simetría de anisotropía perfecta e isotropía cristalina, que presenta separación de puntas.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 2 muestran la evolución de un cristal simulado bajo condiciones de simetría de anisotropía perfecta y baja anisotropía cristalina, $\delta = 0.020$. Este cristal presenta separación de puntas y una velocidad de crecimiento mayor que la del cristal correspondiente a las imágenes (a), (b) y (c).

Ambos cristales presentan bajas velocidades de crecimiento, ya que a un tiempo de 0.6, aún falta por solidificar una importante porción de líquido.

3.2. Simulación de magnitud de anisotropía

Las figuras 3 y 4 muestran cristales con estructura cúbica, simulados con diferentes condiciones de magnitud de anisotropía cristalina, usando valores de $\delta = 0.005, 0.01, 0.020$ y $\delta = 0.050, 0.080, 0.120$, respectivamente.

Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 3 muestran la evolución de un cristal cuya geometría es parcialmente dendrítica. Aunque se presentan brazos primarios y secundarios, se observan remanentes de la estructura no dendrítica: puntas adicionales en direcciones que no

corresponden a las de crecimiento de acuerdo con la estructura cristalina simulada e inestabilidades de la intercara en la zona central.

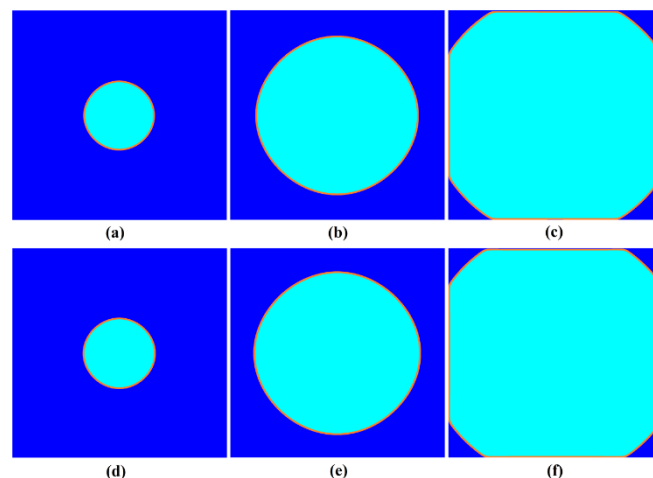


Figura 1: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 0.0$ y $\kappa = 1.0$. (a) $t = 0.08$; (b) $t = 0.2$; (c) $t = 0.32$; con $\delta = 0.000$. (d) $t = 0.08$; (e) $t = 0.2$; (f) $t = 0.32$; con $\delta = 0.020$.

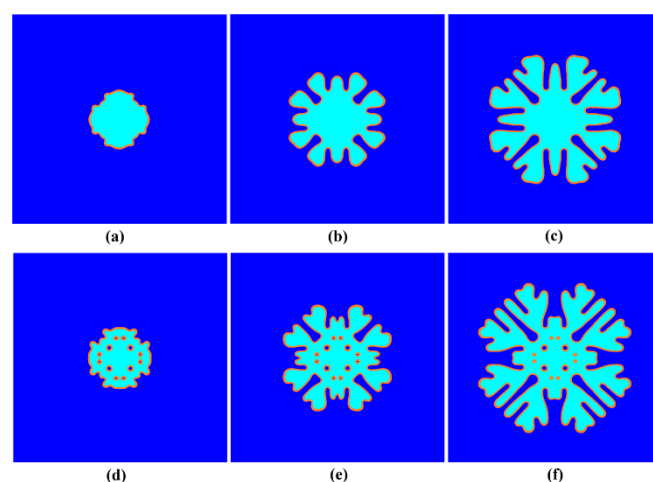


Figura 2: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 0.0$ y $\kappa = 1.8$. (a) $t = 0.2$; (b) $t = 0.4$; (c) $t = 0.6$; con $\delta = 0.000$. (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.4$; (f) $t = 0.6$; con $\delta = 0.020$.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 3 muestran la evolución de un cristal cuya geometría es casi totalmente dendrítica. Aunque aún existen remanentes de la estructura de puntas separadas, la geometría del cristal es casi completamente dendrítica.

Las imágenes (g), (h) e (i) de la figura 3 muestran la evolución de un cristal dendrítico típico de la estructura cúbica simulada, que presenta brazos primarios y brazos secundarios pequeños creciendo con dirección ortogonal a estos.

Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 4 muestran la evolución de un cristal dendrítico cúbico con brazos primarios gruesos y crecimiento diferente en cada brazo secundario, obtenida al simular la solidificación del cristal con un valor moderadamente alto de anisotropía cristalina.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 4 muestran la evolución de un cristal dendrítico cúbico con brazos primarios gruesos y un crecimiento notable en los brazos secundarios.

Puede observarse la interferencia de los brazos secundarios con crecimiento rápido en el desarrollo de los brazos secundarios con crecimiento lento.

Las imágenes (g), (h) e (i) de la figura 4 muestran la evolución de un cristal dendrítico cúbico simulado bajo condiciones de alta anisotropía cristalina, $\delta = 0.120$, que presenta brazos secundarios asimétricos y que crece con una velocidad menor a la de los cristales presentados en las imágenes (a), (b), (c) y (d), (e), (f).

Puede observarse un aumento gradual en la velocidad de crecimiento de los cristales de las figuras 3 y 4, que no continúa en la evolución expuesta en las imágenes (g), (h) e (i) de la figura 4.

Las figuras 5 y 6 muestran cristales con estructura hexagonal, simulados con diferentes condiciones de magnitud de anisotropía cristalina, usando valores de $\delta = 0.005$, 0.01 , 0.020 y $\delta = 0.050$, 0.080 , respectivamente.

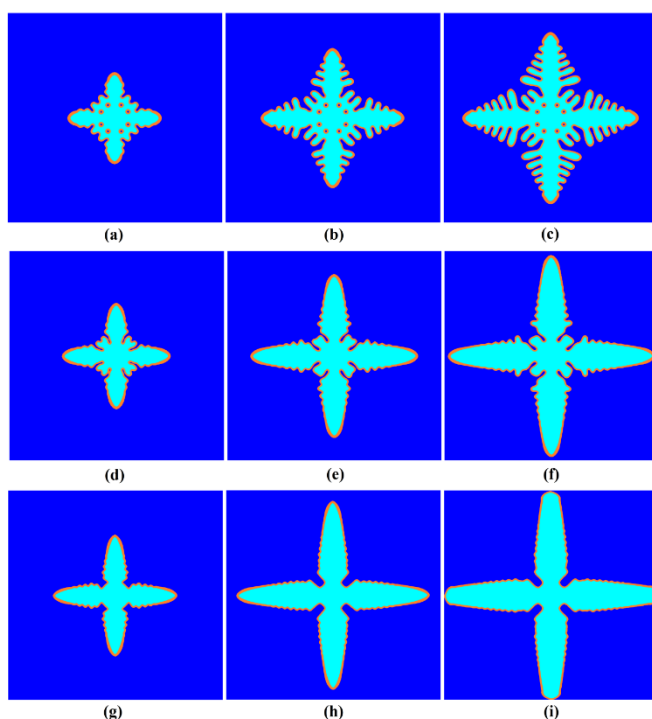


Figura 3: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 4.0$ y $\kappa = 1.8$. (a) $t = 0.2$; (b) $t = 0.32$; (c) $t = 0.4$; con $\delta = 0.005$. (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.32$; (f) $t = 0.4$; con $\delta = 0.010$. (g) $t = 0.2$; (h) $t = 0.32$; (i) $t = 0.4$; con $\delta = 0.020$.

Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 5 muestran la evolución de un cristal dendrítico típico de la estructura hexagonal simulada, que presenta brazos primarios y brazos secundarios.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 5 muestran la evolución de un cristal dendrítico hexagonal similar al presentado en las imágenes (a), (b) y (c), distinto de este en el crecimiento ligeramente más rápido del cristal y en la geometría de los brazos secundarios.

Las imágenes (g), (h) e (i) de la figura 5 muestran la evolución de un cristal dendrítico similar a los presentados en las imágenes (a), (b), (c) y (d), (e), (f), distinto de estos en el

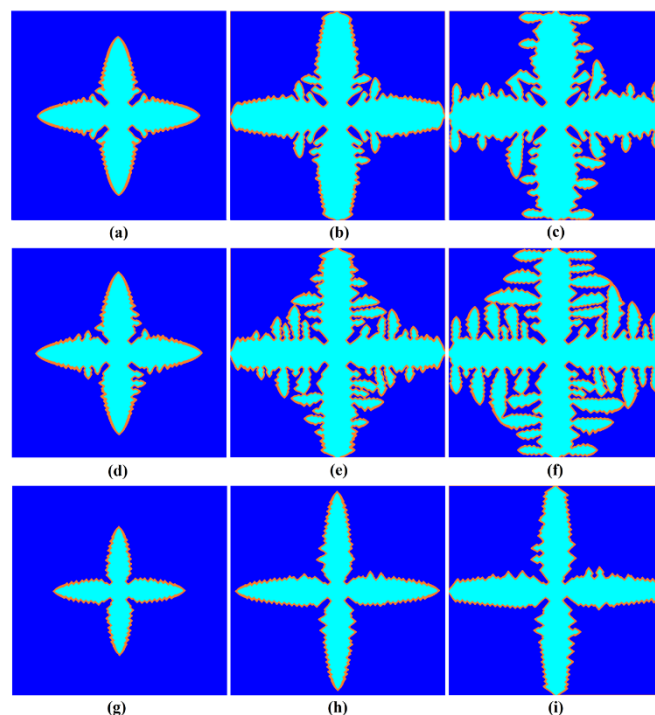


Figura 4: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 4.0$ y $\kappa = 1.8$. (a) $t = 0.2$; (b) $t = 0.32$; (c) $t = 0.4$; con $\delta = 0.050$. (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.32$; (f) $t = 0.4$; con $\delta = 0.080$. (g) $t = 0.2$; (h) $t = 0.32$; (i) $t = 0.4$; con $\delta = 0.120$.

menor número de brazos secundarios y la ligeramente mayor velocidad de crecimiento.

Las imágenes (a), (b) y (c) de la figura 6 muestran la evolución de un cristal dendrítico hexagonal con menor velocidad de crecimiento en comparación a las evoluciones expuestas en la figura 5, con menor cantidad de brazos secundarios, obtenida al simular la solidificación del cristal bajo condiciones de alta magnitud de anisotropía cristalina.

Las imágenes (d), (e) y (f) de la figura 6 muestran la evolución de un cristal dendrítico hexagonal que presenta una velocidad de crecimiento menor a la del cristal expuesto en las imágenes (a), (b) y (c), con brazos secundarios pequeños, obtenida al simular la solidificación del cristal bajo condiciones de alta magnitud de anisotropía cristalina.

3.3. Comparación con dendritas experimentales

La figura 7 muestra (a) una dendrita de austenita (Stefanescu, 2005), (b) el cristal correspondiente a dicha dendrita modelado en tres dimensiones por medio del Método de Campo de Fases y (c) una simulación obtenida en este trabajo.

Aunque en la figura 7 la dendrita de austenita (, imagen (a), puede parecer distinta a la obtenida en dos dimensiones en este trabajo, imagen (c), la imagen muestra un brazo primario sobre el cual se desarrollan brazos secundarios, al igual que en la simulación de este trabajo, que muestra una vista total del cristal, con cuatro brazos primarios y brazos secundarios pequeños creciendo desde estos. Esto puede comprobarse con el cristal modelado correspondiente a la dendrita de austenita, imagen (b), cuya vista superior mostraría una geometría igual a la de la simulación del presente trabajo.

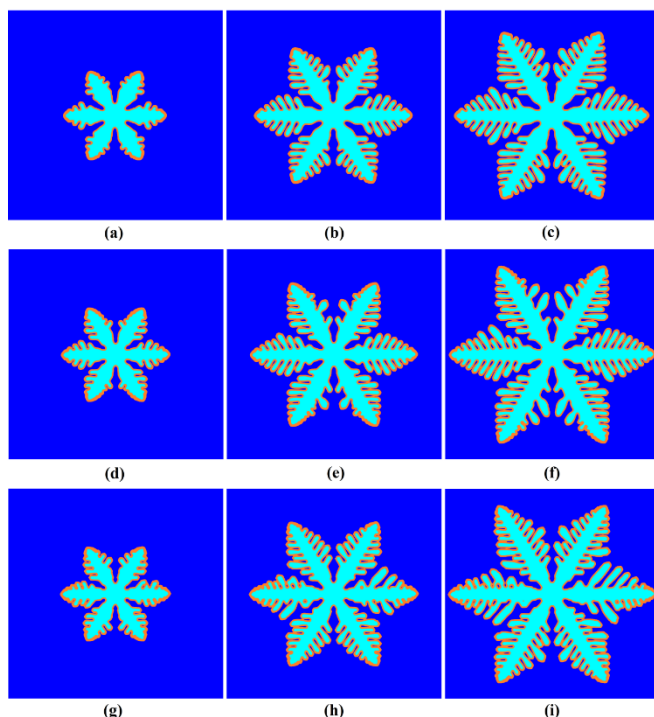


Figura 5: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 6.0$ y $\kappa = 1.8$. (a) $t = 0.2$; (b) $t = 0.32$; (c) $t = 0.4$; con $\delta = 0.050$. (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.32$; (f) $t = 0.4$; con $\delta = 0.080$. (g) $t = 0.2$; (h) $t = 0.32$; (i) $t = 0.4$; con $\delta = 0.120$.

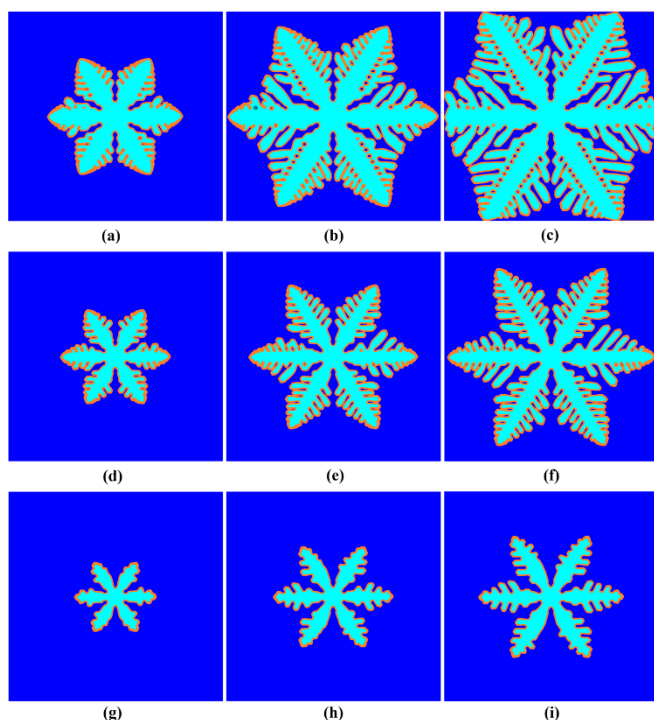


Figura 6: Evolución de la solidificación de cristales bajo condiciones de $j = 6.0$ y $\kappa = 1.8$. (a) $t = 0.2$; (b) $t = 0.32$; (c) $t = 0.4$; con $\delta = 0.050$. (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.32$; (f) $t = 0.4$; con $\delta = 0.080$.

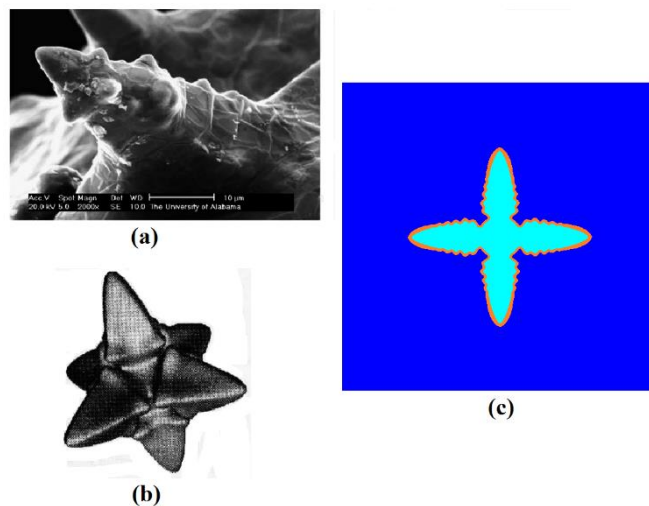


Figura 7: Comparación entre (a) Imagen de Microscopio Electrónico de Barrido (MEB) de una dendrita de austenita; (b) Cristal equiaxial calculado con un modelo de Campo de Fases correspondiente a dicha dendrita; (22) (c) Simulación obtenida con las condiciones de $t = 0.2$, $j = 4.0$, $\kappa = 1.8$ y $\delta = 0.020$.

4. Conclusiones

En este trabajo se utilizó el Método de Campo de Fases para simular la solidificación de metales puros, considerando las variables de la formulación de Kobayashi, llegándose a las siguientes conclusiones:

1. El modelo de Campo de Fases usado en este trabajo permite simular de forma realista la solidificación de cristales dendríticos y no dendríticos, cristales con puntas separadas y poligonales, en metales puros con diferentes estructuras cristalinas.
2. La velocidad de solidificación de un cristal aumenta al incrementar la magnitud de anisotropía, δ , y se presenta un máximo a altos valores de δ , tras el cual, la velocidad disminuye al aumentar δ .
3. A medida que la magnitud de anisotropía, δ , aumenta, la estructura de puntas separadas, existente a bajos valores de δ , se suprime para dar paso a una estructura dendrítica, y en las etapas previas a la supresión completa de dicha estructura, se forma un cristal con geometría intermedia.
4. A bajos valores de calor latente de fusión, la extracción de calor es el mecanismo de crecimiento dominante durante la solidificación, impidiendo el desarrollo de geometrías complejas. En contraste, a altos valores de calor latente de fusión, la magnitud de anisotropía es el mecanismo de crecimiento dominante, provocando la formación de geometrías complejas.
5. Al aumentar el calor latente de fusión, la velocidad de solidificación de un cristal disminuye, por lo que un metal con calor latente de fusión bajo solidificará más rápidamente.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo de Conahcvt y SIP-Beifi-IPN.

Referencias

- Allen, S. M., Cahn, J. W. (1979) A microscopy theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Mater.* 27,1085-1095.
- Glicksman, M.E. (2011). *Principles of solidification: An introduction to modern casting and crystal growth concepts*. Springer, EUA.
- Ingo., S. (2009). Phase-field models in materials science. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17, 1-31.
- Kobayashi, R.O. (1993). Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth, *Physica D* 63, 410-423.
- Stefanescu, M. D. (2005). Solidification and modelling of cast iron-a short history of the definite moments. *Mater. Sci. Eng. A* 413-414, 327-3336.
- Stefanescu, D. M. (2009). *Science and engineering of casting solidification*. Springer, EUA.