SIMULAÇÃO NUMÉRICA E VISUALIZAÇÃO GRÁFICA DE CRESCIMENTO DE MACROCRISTAIS

Nanci Naomi Arai

Aluna do curso de Computação Científica, Universidade de Taubaté

Orientadores:

Dr. Stephan Stephany, Pesquisador

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada - LAC

Dr. Maurício Fabbri, Professor Titular

Núcleo de Desenvolvimento Tecnológico - NDT

Universidade São Francisco - USF

A modelagem de perfis de composição em cristais binários crescidos por solidificação direcionada exige a solução de um problema difusivo em presença da fronteira móvel sólido-líquido. São bastante conhecidas na literatura as soluções de Scheil e de Smith-Tiller-Rutters (STR) [1], que são válidas para números de Peclet Pe muito pequenos ou muito grandes, respectivamente. Modelos de crescimentos a velocidades intermediárias necessitam ser tratados por técnicas puramente numéricas. Aproximamos as equações de transporte por um modelo médio unidimensional difusivo, e discretizamos pelas técnicas de diferenças finitas e volumes de controle [2]. Essa solução numérica apresentou resultados muito bons em comparação com os modelos de Scheil e de Smith-Tiller-Rutters (STR), porém sua utilização implica num elevado número de cálculos, devido ao fato de trabalharmos com uma malha de discretização bastante fina. Visando otimizar esses cálculos, buscamos novos métodos que fornecessem uma solução que satisfizesse as condições de contorno e fosse próxima da solução exata. Uma solução confiável, com erros mínimos e exigindo menos esforço computacional, possibilitaria a utilização de métodos de regressão para a recuperação de constantes físicas do material e da dinâmica de crescimento, a partir de medidas dos perfis de composição.

Numa primeira etapa apresentamos um modelo global para a composição instantânea na fase líquida, que prevê um decaimento exponencial generalizado, capaz de aproximar suficientemente bem a solução correta do problema difusivo para quaisquer valores de Pe . Em contraposição à solução STR, que emprega uma série infinita de ondas caminantes de comprimentos característicos múltiplos do comprimento de difusão natural, a abordagem proposta descreve o perfil de composição no líquido através de duas frentes simétricas de mesmo comprimento, de modo a se garantir a condição de fluxo nulo no extremo final da ampola de crescimento [3]. Com esse método proposto, verificamos que a função escolhida modelou adequadamente o problema, mesmo durante os transientes dos perfis composicionais. Em comparação com as técnicas numéricas tradicionais de discretização, que exigem o emprego de malhas com centenas (ou milhares) de pontos, e a solução de um sistema algébrico correspondente, o modelo apresentado permite calcular os perfis de concentração, através do ajuste de dois parâmetros, resolvendo-se nesse caso, um sistema de duas equações a cada instante de tempo. Sendo válida para quaisquer valores de Pe .

Numa segunda etapa estudamos métodos para a recuperação das constantes físicas de

crescimento, e, nos casos onde o diagrama de fase não é bem conhecido, para a recuperação da taxa instantânea de segregação na interface, a partir do perfil de composição observado no cristal [4]. Esta situação representa um problema inverso, onde a constante de difusão mútua D na fase líquida, e a taxa de repartição de soluto K na interface, devem ser recuperadas a partir da solução do problema difusivo. O problema inverso é formulado como um problema de otimização não-linear com restrições, no qual o problema direto de difusão é solucionado iterativamente, gerando sucessivas aproximações dos perfis a serem estimados. A iteração continua até que uma função objetivo, que representa a diferença quadrática entre os dados experimentais e aqueles obtidos pelo modelo direto, convirja para um valor mínimo especificado.

Referências

- [1] Smith, W. A.; Tiller, W.A.; Rutter, J.W. *A Mathematical Analysis of Solute Redistribution During Solidification*, Can. J. Phys. 33, 723 (1955).
- [2] Maliska, C.R. *Transfeência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC/, RJ, 1995.
- [3] Arai, N. N.; Fabbri, M. *Uma Solução Global para a Redistribuição de Soluto durante o Crescimento Difusivo em Cristais Binários*, painel apresentado no XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambú, MG, 1998.
- [4] Arai, N. N.; Fabbri, M.; Stephany S. *Formulação Inversa para a Recuperação das Constantes Físicas e da Taxa de Segregação em Crescimentos Bridgmann Difusivos*, painel apresentado no XXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambú, MG, 1998.