

Simulação de microestruturas de ligas ternárias pelo método do Campo de Fase

FURTADO, Alexandre Ferreira

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica – UFF/EEIMVR
Av. dos Trabalhadores, n. 420, Volta Redonda, RJ. CEP: 27255-125
e-mail: furtado@metal.eeimvr.uff.br

RESUMO

Um modelo do Campo de Fase para a solidificação de ligas ternárias Fe-C-P é proposto. Neste trabalho a relação entre as propriedades do material e os parâmetros do modelo é apresentada. No desenvolvimento do trabalho foi aplicado o modelo para a solidificação de ligas ternárias para a análise da difusividade dos solutos. Para os cálculos bidimensionais, o crescimento dendrítico é simulado para ligas ternárias de Fe-C-P. As alterações na concentração de fósforo afetam a velocidade da interface sólido/líquido. Essas alterações na velocidade da interface sólido/líquido se devem à baixa difusividade do fósforo durante o processo de solidificação.

Palavras chaves: Campo de Fase, solidificação, segregação, dendrita.

Simulation of microstructures of ternary alloys via Phase Field method

ABSTRACT

A phase field model for solidification of ternary alloys is proposed. In this paper, the relations between material properties and phase-field parameters are presented. In the development of this work, the ternary-alloy solidification model for the analysis of diffusivity is employed. For two-dimensional computations, the dendritic growth is simulated for Fe-C-P ternary alloys. The change in phosphorus concentration affects the interface velocity. This change in the interface velocity is due to the small diffusivity of phosphorus during the solidification process.

Keywords: Phase Field, solidification, segregation, dendrite.

1 INTRODUÇÃO

É relativamente pouco conhecido que a produção de quase todos os objetos envolve a solidificação em algum estágio do processo de fabricação. A solidificação é importante porque é o principal fenômeno do processo de fundição, que é um método muito econômico para obtenção de produtos. Atualmente, grande parte dos conceitos e métodos desenvolvidos pela pesquisa dos fenômenos de solidificação já podem ser transferidos para a escala industrial com bastante sucesso, decorrendo daí um notável aperfeiçoamento da qualidade das peças obtidas por tal processo. Isso faz do estudo do processo de solidificação uma poderosa ferramenta. Nas tecnologias convencionais, o conhecimento e controle desse processo abrem horizontes promissores em função do seu potencial econômico, já que é o caminho mais curto entre a matéria-prima metálica e a forma final do produto. Essa conjuntura coloca a solidificação como uma das mais importantes especialidades da Metalurgia e da Ciência dos Materiais.

A solidificação do metal no molde não se efetua de modo passivo, como poderia parecer à primeira vista. Na realidade, a transformação líquido/sólido pela qual passa o metal é de natureza ativa e dinâmica, já que durante a mesma ocorrem eventos como a nucleação e o crescimento de estruturas dendríticas que se não forem devidamente controladas, podem comprometer o desempenho do produto final ou, até mesmo, interromper a seqüência de fabricação. Tais eventos podem dar origem a diversos tipos de heterogeneidade que interferem drasticamente na qualidade metalúrgica do produto final. Portanto, a solidificação e as estruturas obtidas provenientes desse processo, conhecidas como estruturas dendríticas, são muito importantes do ponto de vista prático, uma vez que influenciam fortemente as propriedades dos produtos.

Como todas as transformações de fase, a solidificação se processa em duas etapas sucessivas: nucleação e crescimento da nova fase em meio à anterior. Assim sendo, o termo nucleação traduz o modo pelo qual a fase sólida surge de maneira estável, no seio da fase líquida, sob a forma de pequenos núcleos. Por outro lado, o termo crescimento traduz o modo pelo qual esses núcleos crescem sob a forma de cristais ou grãos cristalinos. A nucleação pode processar-se sob as duas seguintes condições:

- a) Nucleação heterogênea – a fase sólida nucleia em meio à fase líquida, contando com a contribuição energética de agentes estranhos ao sistema, tais como impurezas, inclusões sólidas, paredes do molde, inoculantes e aditivos que correspondem aos casos mais frequentes na prática.
- b) Nucleação homogênea – a nucleação da fase sólida em meio à fase líquida, sem que haja interferência ou contribuição energética de elementos ou agentes estranhos ao sistema.

O método do Campo de Fase, foco deste trabalho, não inclui o tipo de nucleação (heterogênea ou homogênea). Admite-se que um núcleo adicionado previamente ao sistema será estável e; dependendo das condições do sistema, tais como o super-resfriamento (ΔT), poderá desenvolver-se.

A maneira pela qual o núcleo sólido cresce durante a solidificação vai depender da estrutura atômica da interface sólido/líquido, que pode ser dividida em dois tipos [1]:

- a) Interface difusa, que se caracteriza pela separação entre o sólido (região ordenada atômica) e o líquido (região desordenada atômica) por meio de uma faixa mista de regiões ordenadas e desordenadas com espessura de aproximadamente 50 átomos.
- b) Interface facetada, que se caracteriza pela separação entre a fase sólida e a líquida por meio de uma faixa abrupta e nítida com não mais que 5 átomos.

A interface difusa é normalmente encontrada nos metais, enquanto a interface facetada é típica dos cerâmicos, segundo Furtado [1].

No método do Campo de Fase, a espessura da interface é uma questão importante, pois o método correlaciona um parâmetro ϵ_0 com a espessura real da interface. Este parâmetro tem uma ordem de grandeza superior à da espessura da interface; isso permite que se utilizem, durante as simulações, malhas mais grosseiras com um número menor de volumes de controle, minimizando, portanto, o esforço computacional.

Em muitas situações práticas é impossível a determinação de uma solução analítica pelos modelos matemáticos tradicionais para tratar os processos de solidificação. Os métodos tradicionais de simulação, baseados em equações de transporte clássicas, tornam-se ineficientes para o tratamento de fenômenos onde devem ser considerados regimes de solidificação metaestáveis como, por exemplo, no caso de substâncias puras, onde a frente da solidificação avança através de uma fase líquida super-resfriada, ou ainda no caso de solidificação de ligas, onde pode haver instabilidades da frente devido ao super-resfriamento constitucional. Nestes casos a interface sólido/líquido pode adquirir uma geometria complexa, que depende localmente da curvatura, da velocidade de solidificação e, ainda, sob a influência da anisotropia. Por esta razão um considerável esforço tem sido empregado no desenvolvimento de métodos numéricos nos últimos vinte anos.

Em particular, o método do Campo de Fase tem-se tornado muito popular devido à sua habilidade em simular o processo de solidificação com interface sólido/líquido complexa. O primeiro trabalho sobre o Método do Campo de Fase foi proposto por Caginalp [2], que data do início dos anos 80. A partir desse trabalho, vários modelos foram desenvolvidos principalmente para a solidificação de materiais puros [3-5] e depois estendidos para a aplicação de ligas binárias [6-7]. Em geral nos trabalhos com o método do Campo de Fase as soluções das equações são obtidas por diferenças finitas, e para o caso de ligas considera-se o crescimento de dendritas à temperatura constante. No presente trabalho, todas as equações foram resolvidas numericamente pelo método dos volumes finitos: para a equação de energia foi utilizado um esquema implícito, enquanto as equações de campo de fases e do soluto foram resolvidas com um esquema explícito. Em todas as simulações admite-se um único núcleo sólido estável adicionado previamente ao domínio líquido.

Será considerado o método do Campo de Fase aplicado ao fenômeno de solidificação, especialmente a ligas ternárias (Fe-C-P), a partir de condições prescritas, tais como o super-resfriamento e concentrações de soluto, levando-se em conta os efeitos da tensão superficial, cinética do super-resfriamento e anisotropia cristalina. A razão de estudar o fósforo é que, mesmo presente em pequenas quantidades nos aços, este soluto exerce grande influência sobre sua qualidade. O fósforo em geral é considerado como um elemento nocivo, devido à fragilidade a frio que confere aos aços, principalmente em aços de alto carbono e quando o seu teor ultrapassa certos limites [8]. Por essa razão, teores máximos aceitáveis de fósforo são especificados.

2 MODELAMENTO MATEMÁTICO

O modelamento matemático apresentado neste trabalho consiste na solução simultânea das equações de energia, fases e concentração de carbono e fósforo. O método do campo de fase assume o crescimento de um ou vários núcleos sólidos na fase líquida. Em particular, neste trabalho, será considerada uma única

semente a crescer. Portanto, existem três regiões a serem consideradas: sólido, o líquido e a interface. Todo o domínio é representado por uma distribuição de uma única variável de estado conhecida como parâmetro de ordem (ϕ) ou variável de fase.

A equação da energia adotada neste trabalho é definida por [5]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla^2 T + \frac{\Delta H}{C_p} h'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (1)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa o termo transiente da equação. O primeiro termo do lado direito representa o termo difusivo, D é a difusividade térmica e T , a temperatura.

O segundo termo representa o termo fonte, onde C_p é o calor específico, ΔH representa o calor latente liberado na região da interface e $h'(\phi)$ é conhecida como função suavizante, que será definida posteriormente. $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ é a variação temporal do parâmetro de ordem (ϕ).

A equação de fases é definida por [9]:

$$\frac{1}{M} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - w g'(\phi) + h'(\phi) \frac{RT}{V_m} \text{Ln} \left[\frac{(1 - (c_{CS}^e + c_{FS}^e))(1 - (c_{CL} + c_{FL}))}{(1 - (c_{CL}^e + c_{FL}^e))(1 - (c_{CS} + c_{FS}))} \right] \quad (2)$$

Na equação 2, M é a mobilidade da interface, $\varepsilon^2 \nabla^2 \phi$ representa o termo difusivo. O último termo do lado direito representa a força motriz do processo de solidificação, e $W g'(\phi)$ representa a energia livre de excesso devido à superfície, ou seja, a tensão superficial na região da interface. R é a constante dos gases, e V_m é o volume molar. C_{CS}^e e C_{FS}^e são as concentrações em equilíbrio de carbono e fósforo na região do sólido. C_{CL}^e e C_{FL}^e representam as concentrações em equilíbrio no líquido. C_{CL} e C_{FL} são as concentrações de carbono e fósforo na região líquida. C_{CS} e C_{CS} são as concentrações na região do sólido.

As concentrações de soluto nas duas regiões são calculadas pelas equações 3 e 4, de acordo com Ode e colaboradores [9]:

$$\frac{\partial C_C}{\partial t} = \nabla \left(D_C(\phi) \left\{ (1-h(\phi)) \frac{C_{CL}(1-(C_{CL}+C_{FL}))}{1-C_{FL}} + h(\phi) \frac{C_{CS}(1-(C_{CS}+C_{FS}))}{1-C_{FS}} \right\} \bullet \nabla \text{Ln} \frac{C_{CL}}{1-(C_{CL}+C_{FL})} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_F}{\partial t} = \nabla \left(D_F(\phi) \left\{ (1-h(\phi)) \frac{c_{FL}(1-(C_{CL}+C_{FL}))}{1-C_{CL}} + h(\phi) \frac{C_{FS}(1-(C_{CS}+C_{FS}))}{1-C_{CS}} \right\} \bullet \nabla \text{Ln} \frac{C_{FL}}{1-(C_{CL}+C_{FL})} \right) \quad (4)$$

Nas equações 3 e 4, D_C e D_F são as difusividades do carbono e fósforo nas regiões do sólido e líquido. Como a interface admitida nesse trabalho tem espessura finita considera-se a difusividade do soluto no líquido nessa região.

No método do Campo de Fase, o estado de todo o sistema (núcleo sólido, meio líquido e interface) é representado continuamente por um único parâmetro conhecido como variável do Campo de Fase (ϕ). Por exemplo, $\phi = +1$, $\phi = 0$ e entre 0 e +1 representam o núcleo solidificado, o meio líquido e a interface respectivamente. Por consequência, a interface é a região localizada entre os valores de +1, que representa a fase sólida, e 0 que representa o meio líquido. A função suavizante $h(\phi)$ e a função que modela a tensão superficial na região da interface $g(\phi)$ são representadas abaixo [5]:

$$h(\phi) = \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (5)$$

$$g(\phi) = \phi^2 (1 - \phi)^2 \quad (6)$$

As equações (5) e (6) são amplamente utilizadas nos trabalhos com o método do Campo de Fases. Note que $h'(\phi)$ e $g'(\phi)$ é nulo para $\phi = 0$ (região do líquido) ou quando $\phi = +1$ (região dos sólidos). Isto garante que o segundo e terceiro termos da equação 2 somente serão diferentes de zero, na região da interface. Uma forma amplamente utilizada nos trabalhos do Campo de Fase para adicionar o fenômeno de anisotropia ao modelo é considerarmos que ε na equação 2 depende de um ângulo de crescimento θ . Este ângulo θ é a orientação da normal da interface em relação a um eixo de referência (no presente caso, o eixo cartesiano x) [5]:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_o (1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta - \theta_o)) \quad (7)$$

Onde δ_ε é a força de anisotropia. O valor de j controla o número de direções preferenciais de crescimento, por exemplo, para $j = 0$ teremos um caso isotrópico, para $j = 4$ teremos uma dendrita com crescimento em 4 direções preferenciais. A constante θ_o é a orientação preferencial de crescimento. ε_o e o w da equação (2) são parâmetros do modelo que são associados com a energia interfacial (σ) e espessura da interface (λ), e são calculados como segue [1]:

$$2\lambda = \int_{0,1}^{0,9} \frac{dx}{d\phi_o} d\phi_o = 2,2\sqrt{2} \frac{\varepsilon_o}{\sqrt{w}} \quad (8)$$

$$\sigma = \varepsilon^2 \int_{-\lambda}^{+\lambda} \left(\frac{\partial \phi_o}{\partial x} \right)^2 dx = \frac{\varepsilon_o \sqrt{w}}{3\sqrt{2}} \quad (9)$$

A mobilidade da interface (M) é expressa como [1]:

$$\frac{1}{M} = \frac{\varepsilon_o^3}{\sigma \sqrt{2w}} \left(\frac{1}{D_{1i}} \xi_1(c_{1L}^e, c_{1S}^e) + \frac{1}{D_{2i}} \xi_2(c_{2L}^e, c_{2S}^e) \right) \quad (10)$$

$$\xi_j = \frac{RT}{V_m} (c_{jL}^e - c_{jS}^e)^2 \times \int_0^1 \frac{h(\phi_o)[1 - h(\phi_o)]}{[1 - h(\phi_o)]c_{jL}^e(1 - c_{jL}^e) + h(\phi_o)c_{jS}^e(1 - c_{jS}^e)} \cdot \frac{d\phi_o}{\phi_o(1 - \phi_o)} \quad (11)$$

Para simular o crescimento da dendrita assimétrica, introduz-se um termo de ruído do lado direito da equação de fases. Esses ruídos são expressos da seguinte forma [1]:

$$ruídos = 16ar\phi^2(1 - \phi)^2 \quad (12)$$

Onde r é um número aleatório entre -1 e +1. O fator de amplitude “ a ” adotado foi de 0,025. Pode-se observar que o ruído tem seu valor máximo em $\phi = 0,5$, sendo nulo em $\phi = 0$ e $\phi = +1$, ou seja, os ruídos são gerados na região da interface.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O método do Campo de Fase foi aplicado para o caso da solidificação de uma liga de Fe-C e ligas de Fe-C-P. As propriedades físicas das ligas utilizadas neste trabalho são apresentadas na tabela 1.

Tabela 1: Propriedades físicas da liga, segundo Ode *et al.* [9].

Propriedades	C	P	Fe
Coefficiente de Partição	0,204	0,102	-----
Inclinação da linha liquidus m_e (K/mol)	1802	1836	-----
Difusividade do soluto no líquido D_L (m ² /s)	$2,0 \times 10^{-8}$	$1,7 \times 10^{-9}$	-----
Difusividade do soluto no sólido D_S (m ² /s)	$6,0 \times 10^{-9}$	$5,5 \times 10^{-11}$	-----
Energia interfacial σ (J/m ²)	-----	-----	0,204
Temperatura de fusão T_m (K)	-----	-----	1810
Volume molar V_m (m ³ /mol)	-----	-----	$7,7 \times 10^{-6}$

Os parâmetros utilizados no método do Campo de Fase são mostrados na tabela 2.

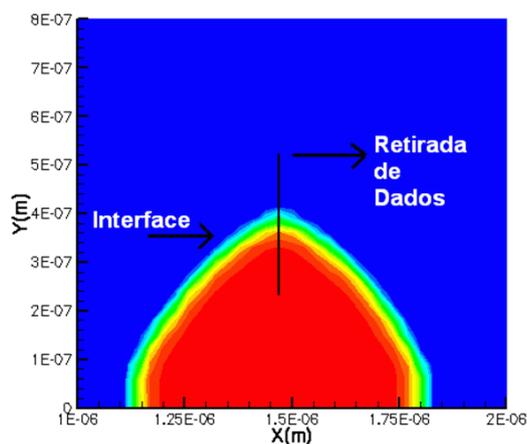
Tabela 2: Parâmetros computacionais.

Constante de anisotropia $\delta\epsilon$	0,05
Espessura da interface ϵ_0 (J/m) ^{1/2}	$1,462 \times 10^{-4}$
Tensão superficial w (J/m ³)	$1,346 \times 10^6$
Mobilidade da interface M (m ³ /sJ)	0,393
Espaçamento da malha $\Delta x = \Delta y$ (m)	3×10^{-8}
Passos no tempo Δt (s)	1×10^{-9}

Primeiramente serão apresentados os resultados do método do Campo de Fase no instante inicial do processo de crescimento da dendrita de Fe-C-P. Da ponta da dendrita serão retirados os dados que constituirão o perfil de soluto do carbono e do fósforo.

3.1 Perfis de Solute do Carbono e Fósforo nas Fases Sólido, Líquido e Interface

As condições de contorno para esta simulação são de fluxo nulo para as equações (1), (2), (3) e (4). A temperatura inicial do domínio é de 1750 K; uma semente (núcleo sólido) foi adicionada previamente na parte inferior do domínio (em $Y=0$ e $X=1,5 \times 10^{-6}$ m); o crescimento preferencial da ponta da dendrita é de 90° em relação ao eixo dos x, e o modo de anisotropia é $J=4$. A concentração molar inicial do carbono e fósforo é de 0,005% e $0,001 \times 10^{-2}\%$, respectivamente. A figura da ponta da dendrita é apresentada a seguir:

**Figura 1:** Início do crescimento da dendrita $t = 4 \times 10^{-7}$ seg.

A região avermelhada representa a região solidificada; a região de cor azul representa o líquido remanescente; localizada entre o sólido e o líquido está a região da interface. As dimensões desta ponta são de $0,7 \times 10^{-6}$ m na sua base e, de altura, aproximadamente $0,4 \times 10^{-6}$ m. O perfil de concentração de carbono e fósforo retirados da dendrita acima é mostrado na figura a seguir:

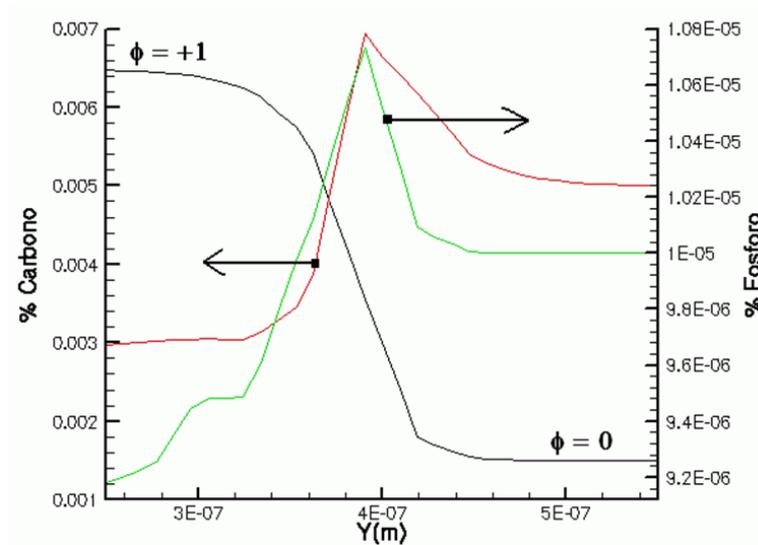


Figura 2: Perfil de concentração de carbono (em vermelho) e fósforo (em verde) na região da interface sólido/líquido.

Os perfis mostrados na figura 2 são para um tempo de 4×10^{-7} s. $\phi = +1$ indica a região sólida, enquanto $\phi = 0$ indica a região líquida. Entre +1 e 0 encontra-se a interface. Pode-se observar que a região do sólido se encontra empobrecida de carbono e fósforo. Isso se deve ao fato de que, durante a solidificação, os solutos são rejeitados para a fase líquida, dessa forma enriquecendo a região logo à frente da interface. Na fase líquida, a concentração dos solutos à frente da interface diminui exponencialmente para a concentração inicial dos solutos no líquido. Observando-se os dois perfis (carbono e fósforo) pode-se também concluir que a camada difusa do carbono é maior que a camada difusa do fósforo. Isso se deve ao fato do carbono apresentar uma difusividade maior que a do fósforo.

3.2 Simulação Microestrutural da Liga Fe-C-P

A figura 3 mostra os resultados obtidos para a simulação microestrutural de uma dendrita de Fe-C-P, com 0,5% C e 0,001% P. As condições de contorno e as condições iniciais são as mesmas adotadas no item anterior.

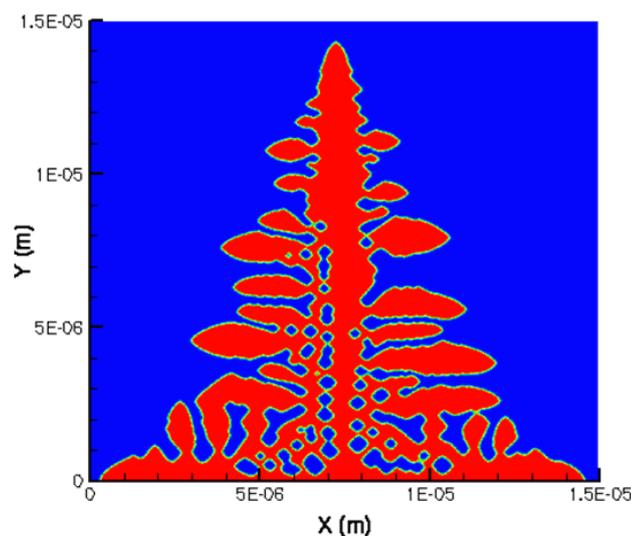


Figura 3: Dendrita calculada a partir de um domínio super-resfriado.

A dendrita apresentada na figura 3 foi calculada a partir de uma semente previamente adicionada ao domínio em $Y = 0$ e $X = 0,75 \times 10^{-5}$ m. Observa-se o crescimento preferencial em três direções (o tempo de crescimento foi de $2,75 \times 10^{-5}$ s). Vale também ressaltar que a velocidade de crescimento da dendrita depende do super-resfriamento inicial (ΔT), como mostrado por Furtado *et al* [5]. A dendrita acima apresenta algumas características encontradas em literaturas/experimentos, que são os braços secundários que crescem a aproximadamente 90° a partir dos braços primários.

A figura 4 apresenta os campos de concentração de carbono e fósforo para a dendrita mostrada na figura 3.

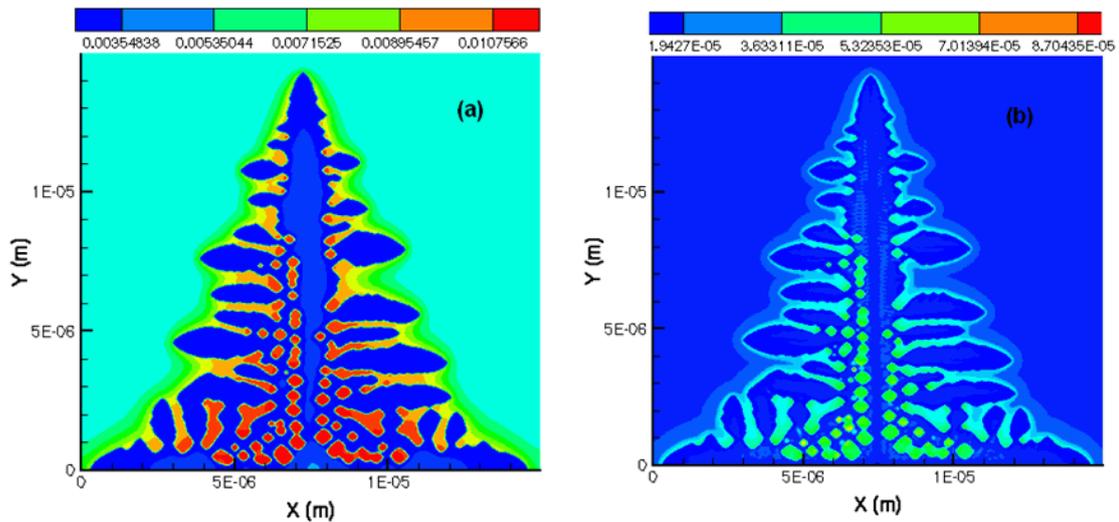


Figura 4: Campo de concentração de carbono: (a) com 0,5% e fósforo (b) com 0,001%.

Pode-se observar que a camada difusa do carbono é mais extensa que a camada do fósforo. Isto é explicado como citado anteriormente devido à difusividade do soluto de carbono ser maior que a difusividade do fósforo. Entre os braços secundários da dendrita pode-se também notar o aprisionamento de soluto de carbono e fósforo, sendo essas regiões as mais ricas em concentração dos dois tipos de soluto. Este acréscimo tem como consequência o abaixamento da temperatura de solidificações nesses pontos, e elas serão as últimas a serem solidificadas.

As seqüências de figuras a seguir mostram os resultados das simulações realizadas para as seguintes ligas:

- a) 0,5% de carbono e 0,01% de fósforo;
- b) 0,5% de carbono e 0,02% de fósforo.

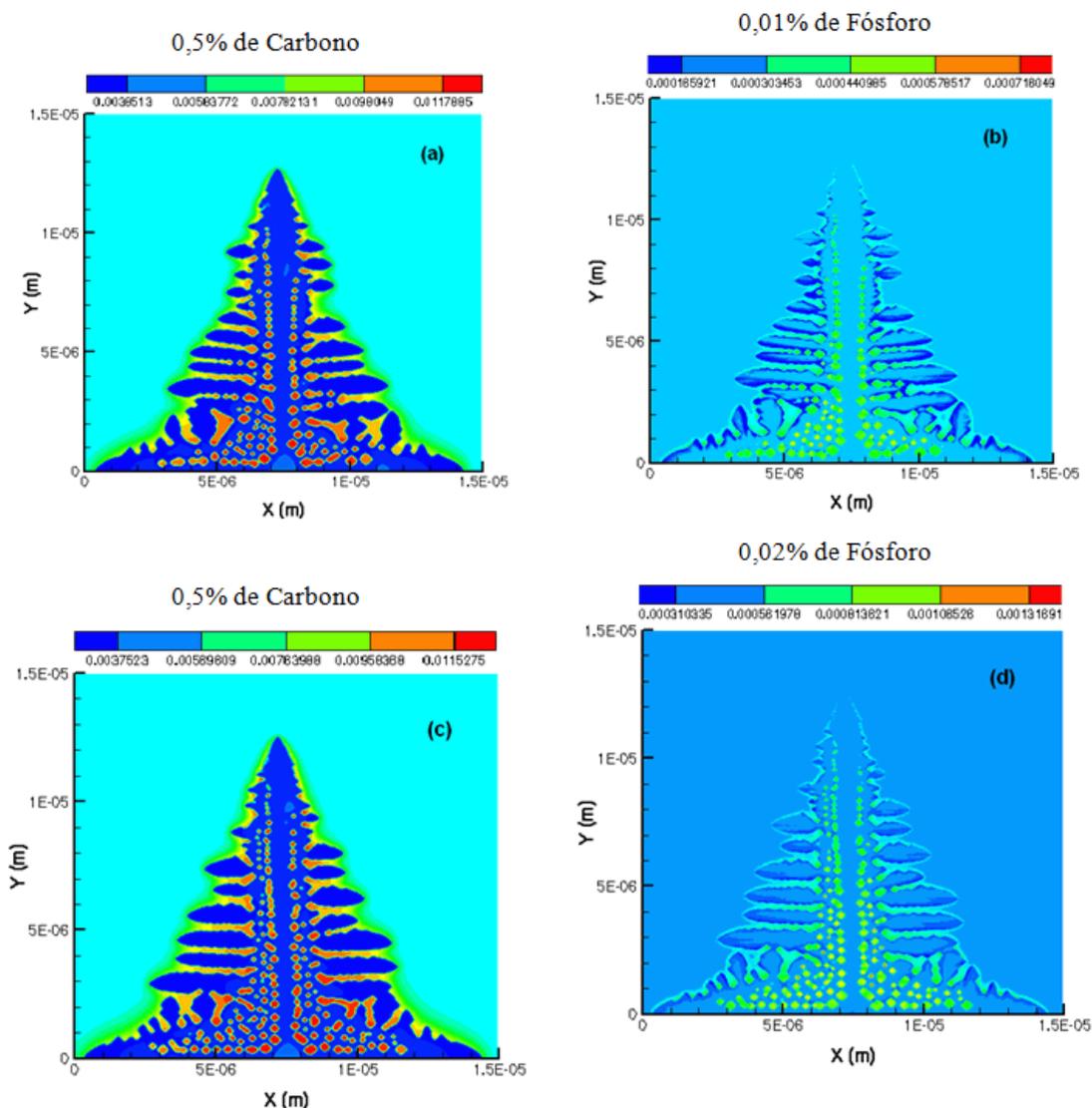


Figura 5: Campo de concentrações de soluto de carbono e fósforo. Para a liga com 0,5% de C e 0,01% de F Fig. 5.(a) e 5.(b), para a liga com 0,5% de C e 0,02% de F Fig. 5.(c) e 5.(b).

O objetivo dessa simulação é fazer um estudo sobre a forma da dendrita para diferentes teores de fósforo. No entanto, dobrando o teor de fósforo da liga, a forma da dendrita permaneceu praticamente inalterada. Portanto, não ocorreram mudanças significativas na espessura dos braços da dendrita ou na forma da dendrita gerada na simulação. No próximo item faremos um estudo sobre a velocidade de avanço da ponta da dendrita para diferentes teores de fósforo.

3.3 Influência dos Teores de Fósforo Sobre a Velocidade de Solidificação

Nesta simulação, as condições iniciais e de contorno são as mesmas adotadas no item anterior com exceção dos teores de fósforo, que foram modificados.

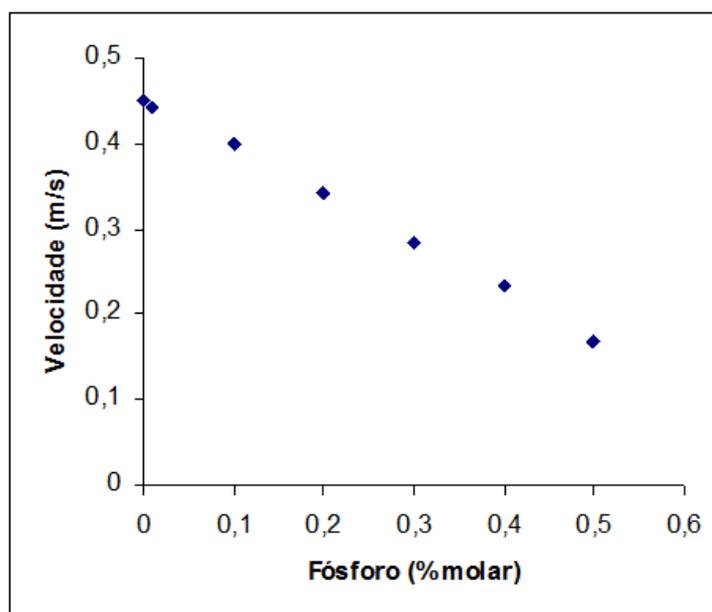


Figura 6: Velocidade da ponta da dendrita versus concentração de fósforo.

A relação entre a velocidade da ponta da dendrita e o teor de fósforo é apresentada na figura 6. Nessa figura pode-se observar que a velocidade diminui com o aumento do teor de fósforo. Isto se deve ao fato do fósforo diminuir a mobilidade da interface, atuando como uma barreira para o avanço da mesma.

4 CONCLUSÕES

Os resultados mostram dendritas semelhantes às encontradas em experimentos ou na literatura, com seus braços secundários crescendo perpendiculares aos braços primários. Outra característica apresentada nessas simulações é a presença de braços secundários pouco desenvolvidos, que ocorre devido ao fenômeno de crescimento competitivo entre os braços secundários. Durante o processo de solidificação, solutos de carbono e fósforo são aprisionados entre os braços secundários. Esse aprisionamento tem como consequência a diminuição da temperatura de solidificação nessas regiões, portanto esses pontos levarão um tempo maior para se solidificarem. Devido à difusividade do carbono ser maior, quando comparada à do fósforo, as simulações apresentam uma camada difusa mais espessa para o carbono. Pode-se concluir ainda que o fósforo afeta a mobilidade da interface sólido/líquido.

5 AGRADECIMENTOS

O autor agradece à Universidade Federal Fluminense (UFF/EEIMVR) pelo suporte financeiro, e à professora Rita de Cássia Mendonça Gonçalves que generosamente contribuiu para o desenvolvimento deste trabalho.

6 BIBLIOGRAFIA

- [1] FURTADO, A.F., *Modelamento do processo de solidificação e formação de microestrutura pelo método do campo de fase*, Tese de D. Sc., UFF/EEIMVR, Volta Redonda, RJ, Brasil, 2005.
- [2] CAGINALP, G., FIFE, P., “Phase-field methods for interface boundaries”, *Physical Review B*, v. 33, pp. 7792-7794, 1986.
- [3] KOBAYASHI, R., “Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth”, *Physical D*, v. 63, pp. 410-423, 1993.

- [4] KIM, S.G., KIM, W.T., LEE, J.S., ODE, M., SUZUKI, T., “Large scale simulation of dendritic growth in pure undercooled melt by phase-field model”, *ISIJ International*, v. 39, n. 4, pp.335-340.
- [5] FURTADO, A.F., CASTRO, J.A., SILVA, A.J., “Simulation of the solidification of pure nickel via the phase-field method”, *Materials Research*, v. 9, n. 4, pp. 349-356, 2006.
- [6] LEE, J.S., SUZUKI, T., “Numerical simulation of isothermal dendritic growth by phase-field model”, *ISIJ International*, v. 39, n. 3, pp. 246-252, 1999.
- [7] ODE, M., SUZUKI, T., “Numerical simulation of initial evolution of Fe-C alloys using a phase-field model”, *ISIJ International*, v. 42, n.4, pp. 368-374, 2002.
- [8] FURTADO, A.F., *Formulação e avaliação de modelo para a previsão de manganês e fósforo no fim de sopro em conversor de sopro combinado*, Dissertação de Mestrado, UFF/EEIMVR, Volta Redonda, RJ, Brasil, 2000.
- [9] ODE, M., LEE J. S., KIM, S.G., KIM, W.T., SUZUKI, T., “Phase-field model for solidification of ternary alloys”, *ISIJ International*, v. 40, n. 4, pp. 870-876, 2000.