

Simulação da formação de fases lamelares em amostras de Cobre e Cobalto utilizando a equação de difusão de Cahn-Hilliard

João S. Streibel¹, Gerardo Martínez²

¹ Bolsista Programa BIC-CNPq/IF-UFRGS
² Orientador

INTRODUÇÃO

Fitas de cobre-cobalto (Cu-Co) produzidas por um processo de resfriamento à uma taxa de 10⁷K/s (quenching) manifestam Magneto-Resistência Gigante (GMR) [1]. Esta é uma propriedade fundamental nas tecnologias de leitura (cabeçotes) em discos-rígidos modernos. A GMR é atribuída à formação de nanofases lamelares nas amostras, observada por microscopia eletrônica de transmissão (TEM). O processo de formação dessas nanofases é desconhecido, mas acredita-se que ele ocorra por um processo de decomposição espinodal [2] durante o quenching, acomodando a estrutura do material numa configuração de equilíbrio metaestável. Afim de verificar isso, utilizamos uma equação de difusão de Cahn-Hilliard (CH) para descrever as lamelas. A CH é uma EDP de 4ª ordem não linear, de solução analítica desconhecida. O presente trabalho pretende integrar numericamente esta equação.

EQUAÇÃO CAHN-HILLIARD

A equação CH utilizada é da forma

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{D} \frac{\partial c}{\partial x} \right) - 2\tilde{K} \left(\frac{\partial^4 c}{\partial x^4} \right)$$

onde $c(x, t)$ é a concentração química em excesso de cobalto, x uma dimensão espacial e t o tempo. K é uma constante, e D é o coeficiente de interdifusão, que é dado conforme a equação

$$\tilde{D} = M(T) \frac{\partial^2 (\Delta G)}{\partial c^2};$$

onde M , a mobilidade atômica, e ΔG (função de Gibbs), são dados por

$$M(T) = \frac{A}{k_B T} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right);$$

$$\Delta G = (1 - c_0)G_{Cu}^0 + c_0G_{Co}^0 - TS^{mix} + \Delta G^{ex}$$

S^{mix} é a entropia de mistura, e ΔG^{ex} refere-se às trocas de energia com o meio interno ao sistema. São dados por:

$$S^{mix} = -Rc_0 \log c_0 - R(1 - c_0) \log(1 - c_0);$$

$$\Delta G^{ex} = (1 - c)c \sum_{i=1}^n (1 - 2c)^i (A_i + B_i T)$$

Onde R é a constante dos gases, enquanto ΔG^{ex} é exprimida em uma expansão de Muggiani-Redlich-Kisten em uma expansão polinomial de até terceira ordem. Os conjuntos de parâmetros (em J/mol) utilizados são descritos de acordo com as seguintes tabelas, obtidas em [3] e [4]:

Para Liu (1994):

$A_1 = 37.100,00$	$B_1 = -5,194$
$A_2 = 2.896,00$	$B_2 = 0$
$A_3 = 3.251,00$	$B_3 = 0$

Para Palumbo (2006):

$A_1 = 44.537,30$	$B_1 = -10,095$
$A_2 = -7.489,40$	$B_2 = 4,161$
$A_3 = 0$	$B_3 = 0$

E para Turchanin (2011):

$A_1 = 34.600,00$	$B_1 = -4,00$
$A_2 = -6.410,00$	$B_2 = 3,7$
$A_3 = 4390,00$	$B_3 = 0,001$

Na solução numérica discretizamos a dimensão x (espacial), tomando as suas derivadas através do método de *finite differences*, e fazemos avanços discretos do parâmetro t (temporal).

RESULTADOS

Os resultados numéricos apontam o seguinte:

- 1) A partir de uma distribuição aleatória inicial, a formação de lamelas se dá sem mudar o período dado inicialmente. Ou seja: não se trata de uma decomposição espinodal que escolhe seu próprio comprimento de onda. Isto é incorreto e é necessário melhorar este aspecto do modelo.
- 2) A simulação explode para concentração 0% e também 100%. Isto significa que a equação não regula o acréscimo ou diminuição de massa. Devemos incorporar um mecanismo regulador para que a Cahn-Hilliard descreva situações realísticas.
- 3) Os 3 conjuntos dos parâmetros são muito diferentes. Mas é necessário resolver os pontos 1) e 2) antes de decidir qual deles representa melhor a situação física das lamelas observadas no caso específico das ligas de Cu-Co.
- 4) As variações de temperatura induzem uma variação exponencial na velocidade da segregação, o que nos indica como deveremos proceder para implementar no futuro uma simulação com quenching de milhões de graus por segundo.

REFERÊNCIAS

- [1] Baibich, M. – Physical Review Letters, Vol. 61, no. 21, pag. 2474 (1988)
- [2] Favvas, E. P; Mitropoulos, A. Ch. – J. Eng. Science and Technology, 1, pages. 25-27 (2008)
- [3] M. A. Turchanin et al., Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol. 46, 77 (2007).
- [4] M. A. Turchanin et al., Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol. 50, 98 (2011).