

**Cálculo de Diagramas de Fase y Simulación por Método de Campo de Fases de Sistemas Binarios y Ternarios que presentan Lagunas de Miscibilidad**

Cristóbal R. Escamilla Illescas<sup>1</sup>, Darío A. Sigala García<sup>1</sup>, Maribel L. Saucedo Muñoz<sup>1</sup>, Víctor M. López Hirata<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería en Metalurgia y Materiales, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional.

## Tabla de Contenido

1	Resumen.....	3
1.1	< Palabras Clave. > .....	3
2	Abstract.....	3
2.1	< Keywords: (3-5 word)> .....	4

## 1 Resumen

Al calcular el diagrama de fase de un sistema de aleación, se puede conocer el número, composición y tipo de fases presentes a las condiciones de fabricación o desempeño. Por otra parte, la simulación computacional de la evolución microestructural del sistema permite predecir los cambios que ocurren durante una transformación de fase en la morfología, tamaño y distribución de las diferentes fases.

Es por esto que el cálculo de diagramas de fase y la simulación de la evolución de microestructuras pueden usarse como técnicas complementarias para aplicaciones como el diseño de nuevas aleaciones o la predicción de vida útil de componentes en servicio.

En este trabajo se calcularon los diagramas de fase de sistemas binarios y ternarios hipotéticos que presentan lagunas de miscibilidad, al resolver las ecuaciones del modelo de solución regular para dos y tres componentes. Para asegurar la formación de lagunas de miscibilidad se usaron diferentes parámetros de interacción repulsivos y se muestra el efecto del cambio de su valor en la microestructura resultante.

Posteriormente, usando los diagramas calculados se identificaron las regiones donde ocurre separación de fases y se determinaron condiciones a simular mediante el Método de Campo de Fases. Para simular la evolución microestructural con este método se resolvió la ecuación de Cahn-Hilliard en una malla cuadrada de 100 nm de lado con 101 nodos por lado, usando una distancia espacial entre cálculos de aproximadamente 1 nm y una distancia temporal entre cálculos de 0.005 s. La ecuación de Cahn-Hilliard fue resuelta usando el Método Explícito de Diferencias Finitas.

### 1.1 < Palabras Clave. >

Transformaciones de fase, diagramas de fase, método de campo de fases, separación de fases.

## 2 Abstract

By calculating the phase diagram of an alloy system it is possible to know the number, composition and type of phases at a certain manufacturing or performance condition. On the other hand, computational simulation of the microstructural evolution of the alloy system allows prediction of the changes that occur during a transformation on phase morphology, size and distribution.

Because of this, calculation of phase diagrams and microstructural evolution simulations can be used as complementary techniques for applications such as new alloy design or life time prediction of in-service components.

In this work, the phase diagrams of hypothetical binary and ternary alloy systems, which have a miscibility gap, were calculated, by solving the regular solution model equations for two and three components. To ensure the formation of miscibility gaps, different repulsive interaction parameters were used, and it is shown the effect these parameters have on the resulting microstructure.

Afterwards, regions where phase separation is possible were identified using the calculated phase diagrams, and the Phase-Field simulation conditions were determined. To simulate microstructural evolution with this method, the Cahn-Hilliard equation was solved for a squared mesh, measuring 100 nm in width and having 101 nodes. Therefore, the distance step between calculations was approximately 1 nm, while the temporal step between calculations was 0.005 s. The Cahn-Hilliard equation was solved with the Finite Differences Method, using an explicit scheme.

**2.1 < Keywords: (3-5 word)>**

Phase transformations, phase diagrams, phase-field method, phase separation.