

4. Луцык В. И., Воробьева В. П., Шодорова С. Я. Верификация Т-х-у диаграммы системы Ag-Au-Bi трехмерной компьютерной моделью // Журнал неорганической химии. 2016. Т. 61. № 7. С. 898-906.
5. Воробьева В. П., Луцык В. И., Шодорова С. Я., Насрулин Э. Р. 3D модель Т-х-у диаграммы In-Sn-Zn для конструирования микроструктуры сплавов // Вестник НовГУ. Великий Новгород: изд-во Новгородского гос. ун-та, 2015. № 6(89). С. 67-74.
6. Воробьева В. П., Зырянов А. М., Шодорова С. Я. 3D компьютерные модели Т-х-у диаграмм систем Mo-Zr-V, Ti-C-V, Ti-Ir-Ru со сменой типа трехфазных превращений // Сборник трудов X межд. Курнаковского совещания по физико-химическому анализу. Самара, 2013. Т. 1. С. 87-92.
7. Халдоияниди К. А. Моделирование взаимных переходов перитектического и эвтектического равновесий в двойных и тройных системах // Журнал физической химии. 2000. Т. 47. № 10. С. 1761-1764.
8. Еременко В. Н. Избранные труды. Воспоминания. К 100-летию со дня рождения. Киев: Наукова думка, 2011. 664 с.
9. Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P., Shodorova S. Ya. Determining of Conditions for Changes of the Three-Phase Reaction Type in a V-Zr-Cr System // Russian Journal of Physical Chemistry. 2015. V. 89. No 13. P. 2331-2338.
10. Синёва С. И., Старых Р. В. И др. Исследование поверхностей ликвидуса и солидуса четырехкомпонентной системы Fe-Ni-Cu-S // Металлы. 2009. № 3. С. 99-106; № 5. С. 93-100; 2010. № 3. С. 92-100; № 6. С. 42-49; 2012. № 2. С. 25-31.
11. Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I., Shodorova S. Ya., Zyryanov A. M. Space Models of Phase Diagrams to Improve the Cu and Ni Technology // Proceedings of 46th International October Conference on Mining and Metallurgy. Bor (Serbia), 2014. P. 144-147.
12. Шодорова С. Я., Воробьева В. П., Луцык В. И. Сборка 3D компьютерных моделей Т-х-у диаграмм систем Fe-Ni-R, Fe-Ni-S, Fe-R-S, Ni-R-S (R=Cu, Co) для улучшения технологии производства никеля, меди и кобальта // Сборник трудов 5-ой Всерос. конференции с межд. участием «Наноматериалы и технологии». Улан-Удэ: изд-во Бурятского гос. ун-та, 2014. С. 159-164.

УДК 004.942

doi: 10.18.101/978-5-9793-0883-8-230-231

Особенности эвтектического роста переохлажденных бинарных расплавов Cu-Zr

А. Н. Медянкин^{1*}, Д. В. Александров¹, П. К. Галенко¹

¹Уральский федеральный университет, 620083, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51,

*e-mail: anton.medyankin@yandex.ru

Аннотация

Многочисленные экспериментальные данные по быстрому затвердеванию эвтектических систем дают представление о формировании метастабильных твердых фаз в исходном (номинальном) сплаве. Происходит подавление эвтектического распада за счет бездиффузионного затвердевания, которое проявляется в высокой, но конечной скорости роста кристаллов. Используя математическую модель быстрого затвердевания сплавов, а также учитывая диффузию атомов на границах пластинчатой эвтектики, построена математическая модель кристаллического роста в переохлажденной жидкости. Приведено ее сравнение с экспериментальными результатами для бинарного сплава Cu-Zr и с моделью, разработанной Триведи, Маньином и Курцем (ТМК-модель).

Ключевые слова: затвердевание, эвтектика, диффузия, примесь, граница, неравновесный, модель.

Features of Eutectic Growth of Cu-Zr Supercooled Binary Melts

A. N. Medyankin^{1*}, D. V. Alexandrov¹, P. K. Galenko¹

¹Department of Mathematical Physics, Ural Federal University, Lenin Str., 51,

Ekaterinburg 620083, Russia,

*e-mail: anton.medyankin@yandex.ru

Abstract

Numerous experimental data on the rapid solidification of eutectic systems give an idea of the formation of metastable solid phases in the initial (nominal) alloy. The eutectic is suppressed decay due to diffusion-less solidification, which manifests itself in a high but finite speed of crystal growth. Using a mathematical model of rapid solidification of alloys, as well as considering the diffusion of atoms at the boundaries of lamellar eutectic, we was constructed a mathematical model of crystal growth in supercooled liquids. Given its comparison with the experimental results for the binary alloy, Cu-Zr and with the model developed by Trivedi, Mangina and Kurz (ТМК-model).

Keywords: solidification, eutectic, diffusion, solute, interface, non-equilibrium, model.

Исследование процессов затвердевания эвтектических сплавов представляет большой научно-практический интерес [1,2,3]. Для моделирования структуры и предсказания основных параметров эвтектических структур разработаны специальные методы теоретического моделирования [4]. Для описания высокоскоростных процессов эвтектических структур была предложена модель [5], в которой учтены условия локальной неравновесности как на границе эвтектика-расплав, так и в объеме расплава.

Особенностью данной модели высокоскоростного эвтектического двухфазного роста является описание экспериментально наблюдаемого перехода от диффузионно-лимитируемого режима к бездиффузионному режиму кристаллизации с формированием однородной и однофазной структуры кристаллов.

В настоящей работе выполнено развитие модели [5]. Полученные результаты позволяют определять скорость (V) и межпластинчатое расстояние (λ) эвтектической колонии в зависимости от величины переохлаждения (ΔT_1) и при условии $V < V_D$ по следующим формулам:

$$V\lambda^2 = \frac{K_2 D f (1-f)}{m_v (1-k_v) (P + \lambda \partial P / \partial \lambda)}$$

где:

$$P + \lambda \partial P / \partial \lambda = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2(n\pi f)}{(n\pi)^3} \left(\frac{p_n}{(1 + (p_n(1 - V^2/V_D^2))^2)^{1/2} - 1 + 2k_v} \right)^2 \frac{p_n(1 - V^2/V_D^2)^2}{(1 + (p_n(1 - V^2/V_D^2))^2)^{1/2}},$$

$$K_2 = 2m_v \left(\frac{\Gamma_\alpha \sin \theta_\alpha}{m_\alpha^v} + \frac{\Gamma_\beta \sin \theta_\beta}{m_\beta^v(1-f)} \right), \quad m_v = \frac{m_\alpha^v m_\beta^v}{m_\alpha^v + m_\beta^v}, \quad p_n = \frac{4n\pi D}{V\lambda}, \quad f = \frac{S_\alpha}{S_\alpha + S_\beta}.$$

Здесь: V – скорость распространения границы раздела фаз, V_D – скорости диффузии атомов в объеме жидкости, θ_α и θ_β – угол наклона касательных к границе раздела жидкость-кристалл для α и β фаз, S_α и S_β – половины толщины пластин для α и β фаз, m_α^v и m_β^v – наклон линий ликвидуса на кинетической фазовой диаграмме для α и β фаз, k_v – коэффициент распределения атомов на границе раздела фаз, Γ_α и Γ_β – коэффициенты Гиббса-Томпсона для α и β фаз, D – коэффициент диффузии.

Дано сравнение результатов теоретического расчета V - ΔT и λ - ΔT на примере сплава Cu-Zr с данными эксперимента по кристаллизации капле сплава в электростатическом левитаторе, а также с данными расчета по ТМК-модели. Для более полного представления об эвтектическом росте, кинетический коэффициент движения границы (μ) был выбран в диапазоне от 1,5 до 0,0015 м/с. Полученные результаты отображены на следующих графиках:

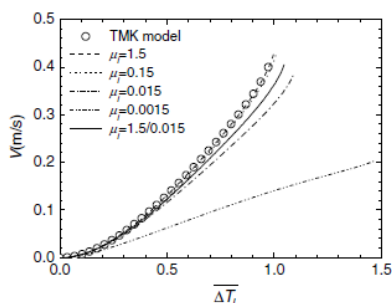


рис. 1. Зависимость скорости роста от переохлаждения

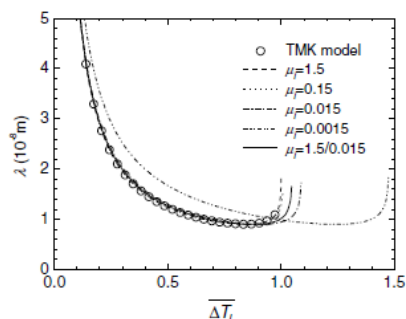


рис. 2. Зависимость межпластинчатого расстояния от переохлаждения

Литература:

1. Курц У., Зам П.Р. Направленная кристаллизация эвтектических материалов. – М.: Металлургия, 1980. – 272 с.
2. Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д., Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов. – М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2010. – 481 с.
3. Курц У., Фишер Д. Фундаментальные основы затвердевания. – М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2013. – 300 с.
4. Akamatsu S., Plapp M. Eutectic and peritectic solidification patterns / S. Akamatsu, M. Plapp // Current opinion in solid state & materials science – 2005. – Vol. 19 – P. 265-314.
5. Galenko P.K., Herlach D.M. Diffusionless crystal growth in rapidly solidifying eutectic systems / P.K. Galenko, D.M. Herlach // Physical Review Letters. – 2006. – Vol. 96 – P. 150602-1-4.

Сведения об авторах

1. Медянкин Антон Николаевич, аспирант кафедры математической физики ИМКН УрФУ, 620083, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51, тел.: 8(343)350-75-41, e-мэйл: anton.medyanikin@yandex.ru.
2. Александров Дмитрий Валериевич, д. ф-м. н., профессор кафедры математической физики ИМКН УрФУ, 620083, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51, тел.: 8(343)350-75-41, e-мэйл: dmitri.alexandrov@urfu.ru.
3. Галенко Петр Константинович, д. ф-м. н., профессор кафедры математической физики ИМКН УрФУ, 620083, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51, тел.: 8(343)350-75-41, e-мэйл: peter.galenko@urfu.ru.