

СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В НИКЕЛЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЕГО ОРИЕНТАЦИИ И ТЕМПЕРАТУРЫ ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Г.М. Полетаев¹, И.В. Каракулова¹, Р.Ю. Ракитин²

¹ *Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия*

² *Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия*

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния на скорость движения фронта кристаллизации в никеле температуры переохлаждения и ориентации фронта относительно кристалла. Рассматривались три ориентации фронта: (100), (110) и (111). Быстрее кристаллизация протекает при ориентации (100), медленнее – при ориентациях (110) и (111). Кинетические коэффициенты кристаллизации для рассматриваемых ориентаций составили 0.38, 0.29 и 0.27 м/(с·К) соответственно. Согласно полученным данным, скорость кристаллизации с ростом температуры переохлаждения растет не монотонно, а имеет максимум при примерно $0.7 \cdot T_{пл}$ (где $T_{пл}$ – равновесная температура плавления), после которого плавно снижается, что объясняется уменьшением диффузионной подвижности атомов в аморфной фазе.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, кристаллизация, фронт кристаллизации, скорость кристаллизации.

Введение

Затвердевание и сопровождающая его кристаллизация металлов и сплавов относятся к технологически распространенным и важным процессам, оказывающим существенное влияние на конечную структуру материала. Несмотря на большое внимание к процессу кристаллизации и продолжительное его исследование, до сих пор остаются нерешенные вопросы даже для чистых металлов, причем это относится не только к кинетике относительно более сложного гомогенного механизма кристаллизации [1–3], связанного с зарождением кристаллических зародышей, но и гетерогенного [4–8], когда процесс сопровождается движением фронта кристаллизации. В частности, в настоящее время существуют две конкурирующие кинетические модели движения фронта кристаллизации: с ограничением тепловых столкновений атомов (collision limited) и с диффузионным ограничением (diffusion limited) [1, 4, 7]. Из-за невозможности проведения соответствующих экспериментов при сверхбольших температурах переохлаждения, которые не превышали, как правило, 20% от температуры плавления [9, 10], долгое время считалось, что скорость затвердевания в чистом виде контролируется кинетикой, ограниченной столкновениями атомов [11–13]. При этом, однако, допускалось, что для движения атома через границу раздела жидкость – кристалл отсутствует энергетический барьер. Позже, при появлении возможности проведения экспериментов с глубоким переохлаждением (например, в [7] достигнуто переохлаждение серебра до 40% от температуры плавления) было показано, что эта модель расходится с экспериментом в области больших значений температур переохлаждения. Согласно данной модели, по мере уменьшения температуры скорость кристаллизации должна монотонно расти, однако в действительности, как показал эксперимент [7], этот рост прекращается примерно при $(0.6–0.8)T_{пл}$ и с последующим понижением температуры скорость даже немного снижается, что хорошо объясняется моделью с диффузионным ограничением, где учитывается снижение диффузионной подвижности атомов в аморфной фазе с понижением температуры.

Другой важной особенностью кинетики фронта кристаллизации является анизотропия его скорости движения. В работах [5, 8, 14–16] с помощью компьютерного моделирования было выяснено, что скорость миграции границы жидкость – кристалл зависит от ориентации границы относительно кристалла. В частности, в упомянутых работах было показано, что быстрее остальных в ГЦК-металлах движутся границы, ориентированные вдоль плоскости (100).

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики влияния на скорость движения фронта кристаллизации в никеле температуры переохлаждения и ориентации фронта относительно кристалла. Рассматривались три ориентации фронта: (100), (110)

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>