

Ф И З И К А

УДК 621.315.592

DOI: 10.31429/vestnik-15-4-93-97

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗНЫХ ФОРМ АНИЗОТРОПИИ
КРИСТАЛЛА НА РОСТ ДЕНДРИТНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Мирющенко Н. И., Малибашев А. В.

MODELING THE INFLUENCE OF DIFFERENT FORMS OF ANISOTROPY
OF CRYSTAL ON THE GROWTH OF DENDRITIC CRYSTALS

N. I. Miryushchenko, A. V. Malibashev

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk, 346428, Russia
e-mail: miruha007@mail.ru

Abstract. The physical-mathematics model demonstrates the process of growth of crystalline structures from a solution, taking into account possible factors affecting crystal growth. Anisotropy of crystals is one of the most significant factors affecting the change in the shape of the inclusion in the process of its movement. The simulation was carried out using numerical methods in the integrated software development environment. The result of the program implementation of the proposed mathematical models and algorithms was the computer system for modeling crystal growth from the solution. With the help of simulation modeling, the influence of different forms of anisotropy on the form of growth of dendritic crystals was studied.

Keywords: physics and mathematical model, crystallization, modeling the growth of crystalline structures, anisotropy of crystals.

Введение

На сегодняшний момент отечественные и зарубежные исследователи проявляют большой интерес к построению моделей кристаллизации, описывающих формирование структуры кристаллизующегося расплава, например, в работе [1] рассмотрены вопросы роста дендритных кристаллов с учетом теплофизических и кинематических аспектов при формировании макроскопических структур из расплава или раствора. Построение физико-математической модели дендритной кристаллизации является актуальной в связи с её широким применением [2–4]. Один из вариантов учета анизотропии в процессе роста из химически чистой и бинарной жидкости с учетом вынужденной конвекции жидкой фазы на основе уравнения диффузии для описания процесса неравномерного захвата примеси поверхностью кристалла приведен в [5]. В [6] проанализировано изменение скорости неизотермического роста вершины параболического дендрита до момента выхода в стационарный режим. Имитационный подход к модели образования дендритов при кристаллизации приведен в [7], где описан также

процесс численного расчета и визуализация роста.

В настоящей работе рассмотрена физико-математическая модель, описывающая процесс роста дендритных кристаллических структур из раствора, с учетом технологически значимых факторов, влияющих на процесс роста кристалла.

В процессе затвердевания металла образуются кристаллы, которые могут иметь разную форму в зависимости от скорости охлаждения, характера и количества примеси. В процессе кристаллизации чаще всего образуются разветвлённые кристаллы, которые принято называть дендритами.

Расстояния между дендритными ветвями влияют на многие физико-механические свойства конструкции, в частности на предел текучести и прочность на разрыв. При образовании кристаллов их развитие идет в основном в направлении, перпендикулярном к плоскостям с максимальной плотностью упаковки атомов. Это приводит к тому, что первоначально образуются длинные ветви, называемые осями первого порядка. Одновременно с удлинением осей первого порядка на их ребрах зарождаются и растут ветви второго

Мирющенко Николай Игоревич, студент Южно-Российского государственного политехнического университета (Новочеркасского политехнического института) им. М. И. Платова; e-mail: miruha007@mail.ru.

Малибашев Александр Владимирович, канд. техн. наук, доцент кафедры физики и электроники Южно-Российского государственного политехнического университета (Новочеркасского политехнического института) им. М. И. Платова; e-mail: a_malib@mail.ru.

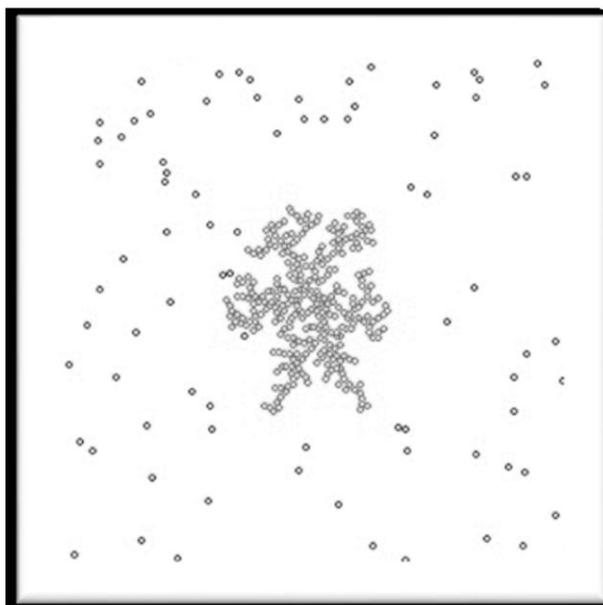


Рис. 1. Результат моделирования роста кристалла без учета анизотропии

порядка, на которых в свою очередь зарождаются и растут оси третьего порядка и т.д. В результате образуются кристаллы в форме дендритов.

Дендритное строение выявляется после специального травления шлифов, поскольку все промежутки между ветвями дендритов заполнены и видны обычно только места стыков дендритов в виде границ зерен. Правильная форма дендритов искажается в результате столкновения и срастания частиц на поздних стадиях процесса. Дендритное строение характерно для макро- и микроструктуры литого металла (сплава).

Анизотропия является одним из значимых факторов, влияющих на изменение формы образующейся дендритной структуры. Знание установившейся (стационарной) формы полученной структуры необходимо для определения многих технических и технологических параметров образцов, например, геометрических размеров активных областей и связанных с ними допустимых значений напряжений и т.д. При необходимости получения заданных глубин внедрения легированных или очищенных областей требуется точный прогноз формы и размеров, а также технологические условия их получения.

1. Описание математической модели

При моделировании использовалась физико-математическая модель, построенная на основе приведенной в [8]. Исходными данными

моделирования выступали начальное распределение концентрации вещества и примеси. Время моделирования определялось с учетом выхода растущей структуры к границе области. При моделировании считалось, что перенос вещества и примеси через границу раствор-кристалл происходило только за счет процесса диффузии.

Для решения дифференциальных уравнений была выбрана неявная разностная схема. Кристаллизация и растворение элементарных ячеек рассматривались как случайные события, происходящие с некоторой вероятностью. Рост грани кристалла моделировался пуассоновским потоком событий. При этом считалось, что вероятности кристаллизации p и растворения q элементарной ячейки являются функциями времени и определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} p &= 1 - \exp\left(-V \frac{\Delta t}{\Delta x}\right), \\ q &= 1 - \exp\left(-W \frac{\Delta t}{\Delta x}\right), \end{aligned} \quad (1.1)$$

где V , W — соответственно средняя скорость роста и растворения грани кристалла, Δt , Δx — соответственно шаги дискретизации по времени и пространству.

При построении модели учитывалось, что скорость роста и растворения зависят от кон-

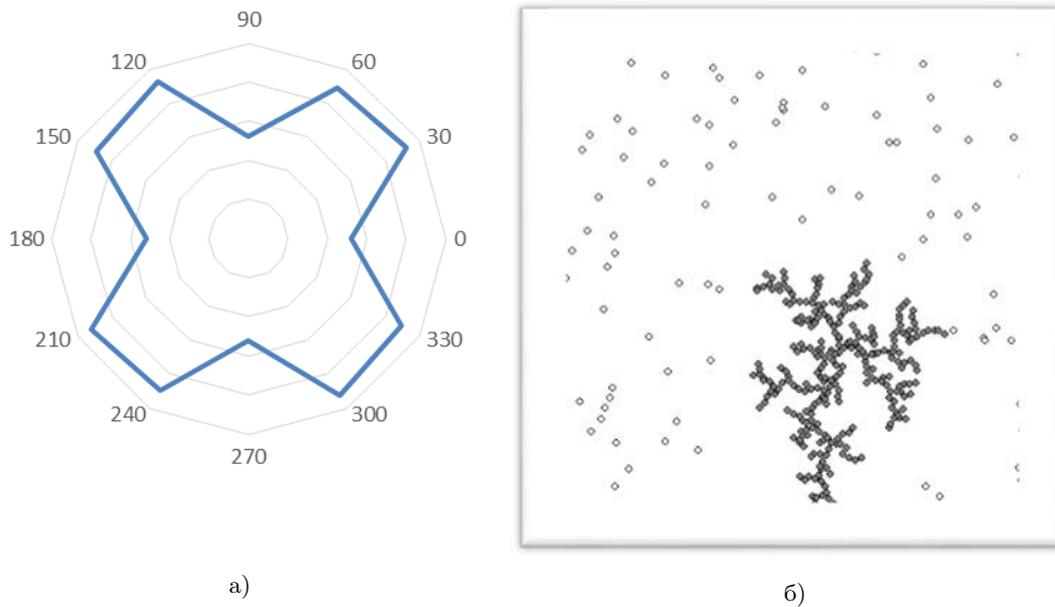


Рис. 2. Результат моделирования роста дендритной структуры с учетом анизотропии 1 типа: а) форма анизотропии, б) смоделированный кристалл

центрации вещества [9]

$$\begin{aligned} V &= V_0 \frac{C_B}{C_0} \left(\frac{\rho_B - C_0}{\rho_B - C_B} \right), \\ W &= V_0 \frac{C_0}{C_B} \left(\frac{\rho_B - C_B}{\rho_B - C_0} \right), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где C_B — концентрация вещества в растворе, ρ_B — плотность вещества в твердой фазе, C_0 — равновесная концентрация, V_0 — скорость роста при равновесной концентрации.

В процессе моделирования полагалось, что событие кристаллизации имеет место, если концентрация вещества в ячейке меньше плотности кристалла и в ней имеется некоторое количество примеси.

При кристаллизации элементарной ячейки считалось, что примесь вытесняется поровну во все граничащие ячейки, независимо от концентрации примеси в них. При растворении изменялся статус ячейки, переводив ее из кристалла в раствор. Дальнейшее изменение распределения концентраций происходит за счет диффузии.

Отличительной особенностью модели является учет влияния анизотропии в процессе роста дендритного кристалла за счет разной вероятности элементарных этапов процессов растворения и кристаллизации в зависимости от азимутального угла направления роста в элементарной ячейке.

2. Обсуждение и результаты

Результатом программной реализации предложенных математических моделей и алгоритмов стала компьютерная система моделирования роста кристалла из раствора. С помощью имитационного моделирования исследовалось влияние разных форм анизотропии на форму роста дендритных кристаллов. Для начала был смоделирован рост кристалла при некотором наборе «типовых параметров» без учета анизотропии, представленный на рис. 1.

Формы анизотропии, использованные в данной работе, определялись с учетом зависимости атомно-кинетических коэффициентов от угла полярной системы координат с соответствием со следующими соотношениями [10]

$$\mu(\varphi) = 2,6 \cdot 10^{-6} (\sin^2(2\varphi) + 1), \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \mu(\varphi) &= \\ &= 2,6 \cdot 10^{-6} \left(\sin^2 \left(1,5\varphi + \frac{\varphi}{4} \right) + 1 \right), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где φ — угол в радианах.

Результат численного моделирования роста дендритной структуры при некотором наборе «типовых параметров» с учетом анизотропии 1 типа (рис. 2а), соответствующей выражению (2.1), представлен на рис. 2б.

Результат численного моделирования роста кристалла при некотором наборе «типо-

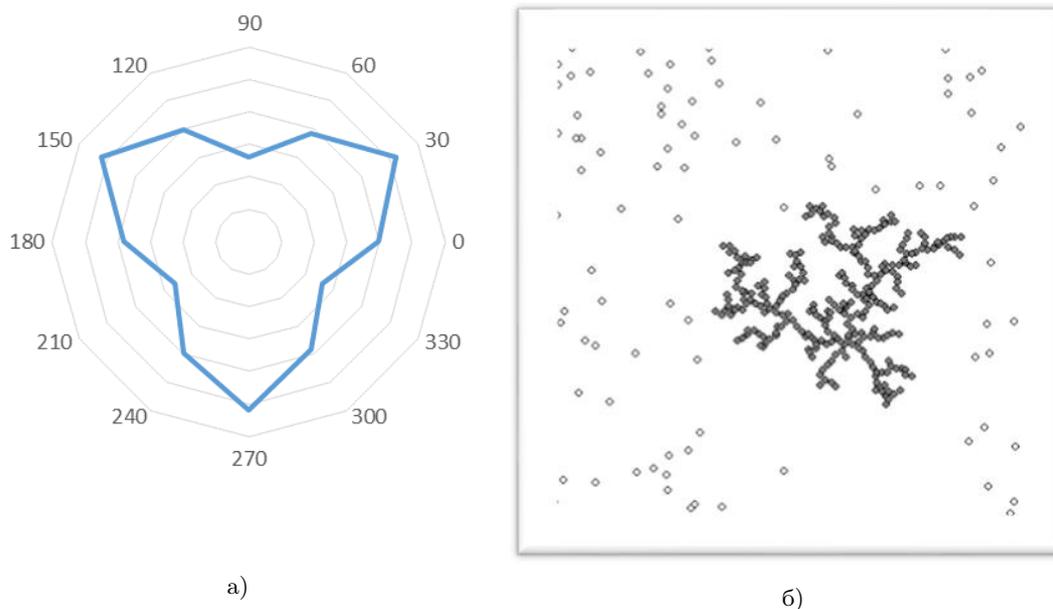


Рис. 3. Результат моделирования роста дендритной структуры с учетом анизотропии 2 типа: а) форма анизотропии, б) смоделированный кристалл

вых параметров» с учетом анизотропии 2 типа (рис. 3а), соответствующей выражению (2.2), показан на рис. 3б.

Анализ полученных графических данных показывает, что анизотропия имеет значительное влияние на форму дендритных кристаллических структур. Анизотропия типа 2 наглядно демонстрирует удлинением осей первого порядка в направлениях максимальных значений атомно-кинетических коэффициентов, измерение направлений роста ветвей второго и следующих порядков.

Выводы

Таким образом, разработана физико-математическая модель роста дендритных кристаллических структур с учетом влияния анизотропии на их форму. На основании проведенного моделирования были получены дендритные структуры при различных формах анизотропии и проанализированы результаты их роста в анизотропных средах.

Литература

1. Шабловский О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве // Прикладная физика. 2012. № 4. С. 40–46.
2. Торопова Л.В., Александров Д.В., Галенко П.К. К вопросу об устойчивом росте анизотропного дендрита при конвективном тепло-
3. Granasy L., Ratkai L., Szalias A., Korbuly B., Toth G.I., Kornyei L., Pusztai T. Phase-field modeling of polycrystalline solidification: from needle crystals to spherulites – A review // Metallurgical and Materials Transactions. 2014. Vol. 45a. P. 1694–1719. DOI: 10.1007/s11661-013-1988-0
4. Козак О.В., Галенко П.К., Александров Д.В. Влияние конвективного потока на рост чистого и сплавного дендрита // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. 2016. Т. 26. Вып. 3. С. 299–311.
5. Нагиев А.Г., Мамедов Д.И. Моделирование нестационарных процессов переноса вещества и адсорбции в пористой среде на основе фрактала «Губка Менгера» // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2009. Т. 52. № 10. С. 141–145.
6. Титова Е.А., Александров Д.В., Галенко П.К. Нестационарный режим роста первичных дендритов // Математическое моделирование в естественных науках. 2016. Т. 1. С. 537–538.
7. Халирашманов Д.И., Маякова С.А. Параллельный алгоритм моделирования роста дендритных кристаллических структур // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2012) : Труды Междунар. научной конф., Новосибирск, 26–30 марта 2012 г. Новосибирск, 2012. С. 704–710.
8. Баранов В.Г., Храмов А.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур // Компьютерная оптика. 2001.

переносе в жидкой фазе у поверхности дендрита // Расплавы. 2018. № 3. С. 320–329.

№ 21. С. 193–197.

9. Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.Л. и др. Современная кристаллография: в 4-х т. М.: Наука, 1979–1981. Т. 2: Структура кристаллов. 1979. 359 с.
10. Малибашев А.В. Влияние анизотропии кристалла на форму жидкого включения, движущегося в поле температурного градиента. В сб. «Кристаллизация и свойства кристаллов: Межвуз. сб. науч. тр. Юж.-Рос. гос. техн. ун-та (НПИ)». Новочеркасск: Набла, 2003. С. 38–43.

References

1. Shablovskiy, O.N. Morfologicheskie svoystva linii rosta dvumernogo dendrita v pereokhlazhdennom rasplave [Morphological properties of two-dimensional dendrite growth line in supercooled melt]. *Prikladnaya fizika* [Applied Physics], 2012, no. 4, pp. 40–46. (In Russian)
2. Toropova, L.V., Aleksandrov, D.V., Galenko, P.K. K voprosu ob ustoychivom roste anizotropnogo dendrita pri konvektivnom teploperenose v zhidkoy faze u poverkhnosti dendrita [On the stable growth of anisotropic dendrite at convective heat transfer in the liquid phase at the surface of dendrite]. *Rasplavy* [Melts], 2018, no. 3, pp. 320–329. (In Russian)
3. Granasy, L., Ratkai, L., Szalias, A., Korbuly, B., Toth, G.I., Kornyei, L., Pusztai, T. Phase-Field Modeling of Polycrystalline Solidification: From Needle Crystals to Spherulites – A Review. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2014, vol. 45a, pp. 1694–1719. DOI: 10.1007/s11661-013-1988-0
4. Kozak, O.V., Galenko, P.K., Aleksandrov, D.V. Vliyanie konvektivnogo potoka na rost chistogo i splavnogo dendrita [The influence of convective flow on the growth of pure and alloyed dendrite]. *Vestnik Udmurtskogo universiteta. Matematika, mekhanika, komp'yuternye nauki* [Bulletin of the Udmurt University. Mathematics, mechanics, computer science], 2016, vol. 26, iss. 3, pp. 299–311. (In Russian)
5. Nagiev, A.G., Mamedov, D.I. Modelirovanie nestatsionarnykh protsessov perenosа veshchestva i adsorbtsii v poristoy srede na osnove fraktala “Gubka Mengera” [Modeling of non-stationary processes of substance transfer and adsorption in a porous medium based on fractal “Menger Sponge”]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Seriya: Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya* [Proc. of Higher Educational Institutions. Series: Chemistry and Chemical Technology], 2009, vol. 52, no. 10, pp. 141–145. (In Russian)
6. Titova, E.A., Aleksandrov, D.V., Galenko, P.K. Nestatsionarnyy rezhim rosta pervichnykh dendritov [Non-stationary mode of growth of the primary dendrite]. *Matematicheskoe modelirovanie v estestvennykh naukakh* [Mathematical modeling in the natural Sciences], 2016, vol. 1, pp. 537–538. (In Russian)
7. Khalirakhmanov, D.I., Mayakova, S.A. Parallelnyy algoritm modelirovaniya rosta dendritnykh kristallicheskikh struktur [Parallel algorithm for modeling the growth of dendritic crystal structures]. In: *Parallelnyye vychislitel'nye tekhnologii (PaVT'2012): Trudy Mezhdunarodnoy nauchnoy konferencii* [Parallel computing technologies (Pavt'2012): Proc. of the Int. Scientific Conf.], Novosibirsk, March 26–30, 2012, 2012, pp. 704–710. (In Russian)
8. Baranov, V.G., Khramov, A.G. Modelirovanie protsessа rosta dendritnykh kristallicheskikh struktur [Modeling of growth of dendritic crystal structures]. *Komp'yuternaya optika* [Computer optics], 2001, no. 21, pp. 193–197. (In Russian)
9. Vaynshteyn, B.K., Fridkin, V.M., Indenbom, V.L., et al. *Sovremennaya kristallografiya. T. 2: Struktura kristallov* [Modern crystallography, vol. 2: Crystal Structure], Nauka, Moscow, 1979. (In Russian)
10. Malibashev, A.V. Vliyanie anizotropii kristalla na formu zhidkogo vklyucheniya, dvizhushchegosya v pole temperaturnogo gradientа [The effect of crystal anisotropy on the shape of a liquid inclusion moving in the temperature gradient field]. In: *Kristallizatsiya i svoystva kristallov: Mezhvuz. sbornik nauchnih trudov Yuzhno-Rossiskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta (NPI)* [Crystallization and properties of crystals: Interuniversity Scientific Proc. of Southern Russian State Tech. University (NPI)], Nabla, Novocherkassk, 2003. pp. 38–43. (In Russian)