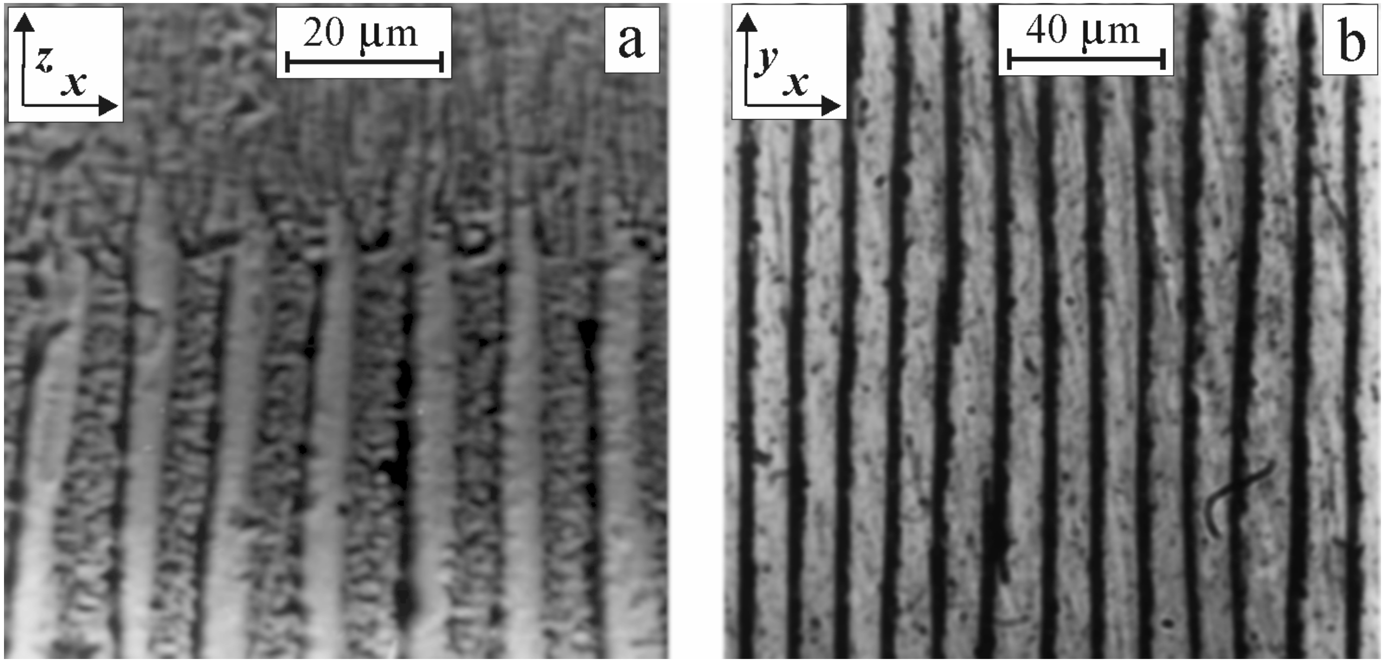
METRO
MEtalurgiczny TRening *On-line*

# Transport masy przed frontem krystalizacji kompozytu *in situ*


Waldemar Wołczyński
IMIM PAN


Edukacja i Kultura

# Mikrostruktura rosnącego kompozytu *in situ*




RYS. 1

**Zorientowany wzrost kompozytu *in situ* (Pb) – (Cd)**

a/ zamrożony front krystalizacji

b/ typowa struktura rosnącego kompozytu *in situ* α / β

# Warunki brzegowe zastosowane do rozwiązania równania dyfuzji według teorii **Jacksona-Hunta**

$$\nabla^2 C + \frac{v}{D}\frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

$\dfrac{\partial C}{\partial x} = 0$ dla $x = 0$ oraz $x = S_\alpha + S_\beta$

$\dfrac{\partial C}{\partial z} = -\dfrac{vC_0^\alpha}{D}$ dla $0 \le x < S_\alpha$

$\dfrac{\partial C}{\partial z} = +\dfrac{vC_0^\beta}{D}$ dla $S_\alpha < x \le S_\alpha + S_\beta$

C – stężenie składnika w fazie ciekłej przed frontem krystalizacji
D – współczynnik dyfuzji w fazie ciekłej

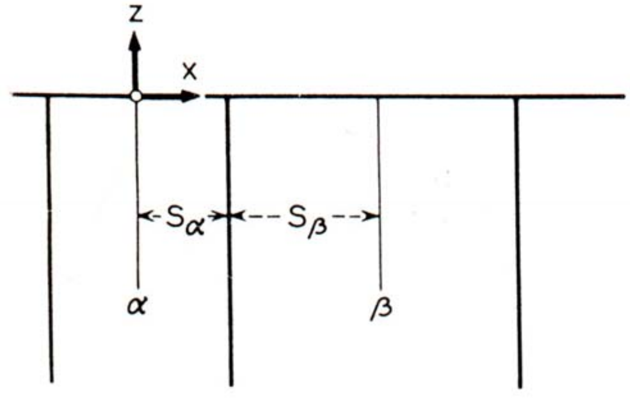
K.A. Jackson, J.D. Hunt, Trans. AIME, **236**, 1129-1142, (1966)

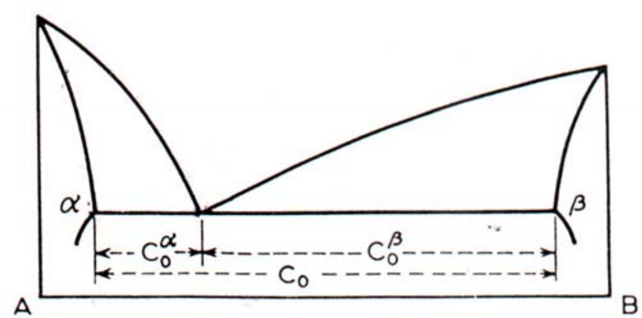
# Rozwiązanie równania dyfuzji według teorii **Jacksona - Hunta**

$$C = C_E + C_\infty + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos\left(\frac{\pi n x}{S_\alpha + S_\beta}\right)\exp\left(-\frac{\pi n z}{S_\alpha + S_\beta}\right)$$

przy

$$B_0 = \frac{C_0^\alpha S_\alpha - C_0^\beta S_\beta}{S_\alpha + S_\beta}$$

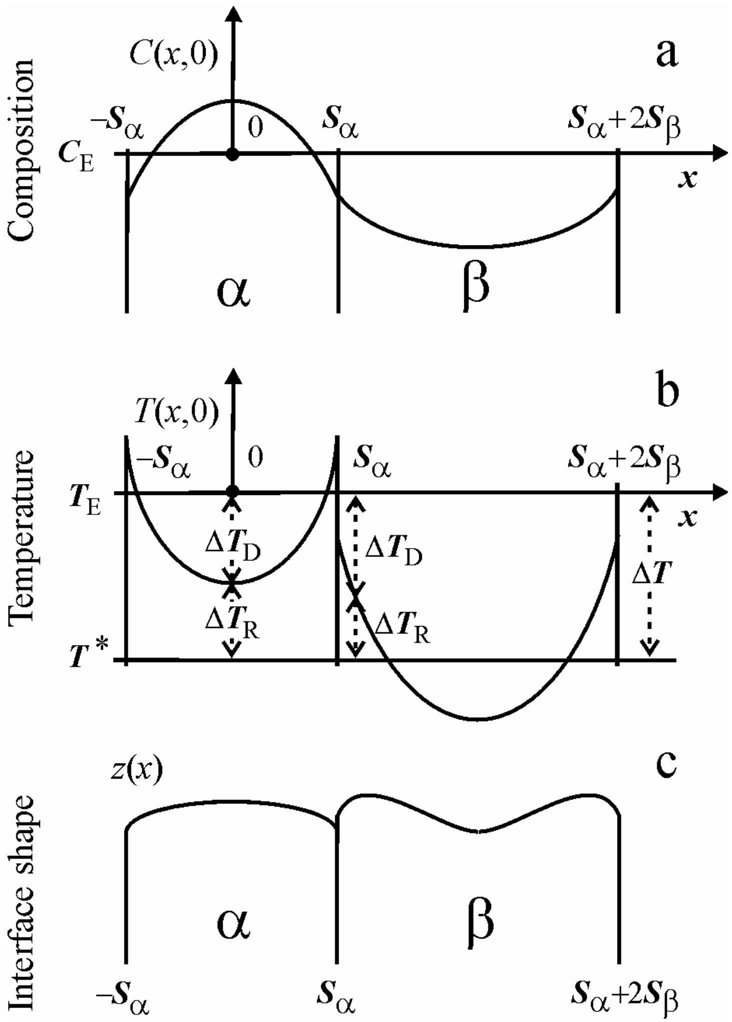



**Wzrost kompozytu *in situ*:**
a/ płaski front krystalizacji według teorii J-H
b/ diagram fazowy według teorii J-H

RYS. 2

# Charakterystyka frontu krystalizacji według teorii Jacksona-Hunta




RYS.3

**Niedoskonałości teorii J-H**

**a/ brak bilansu masy:**
**$C(x,0) - C_E$ dla płytki fazy $\alpha$ nie jest równe $C_E - C(x,0)$ dla płytki fazy $\beta$**

**b/ bilans masy jest spełniony jedynie dla $S_\alpha = S_\beta$ oraz $C_0^\alpha = C_0^\beta$,**

**c/ przechłodzenie przekracza różnicę $\Delta T = T^* - T_E$ wynikającą z koncepcji *idealnie sprzężonego wzrostu***

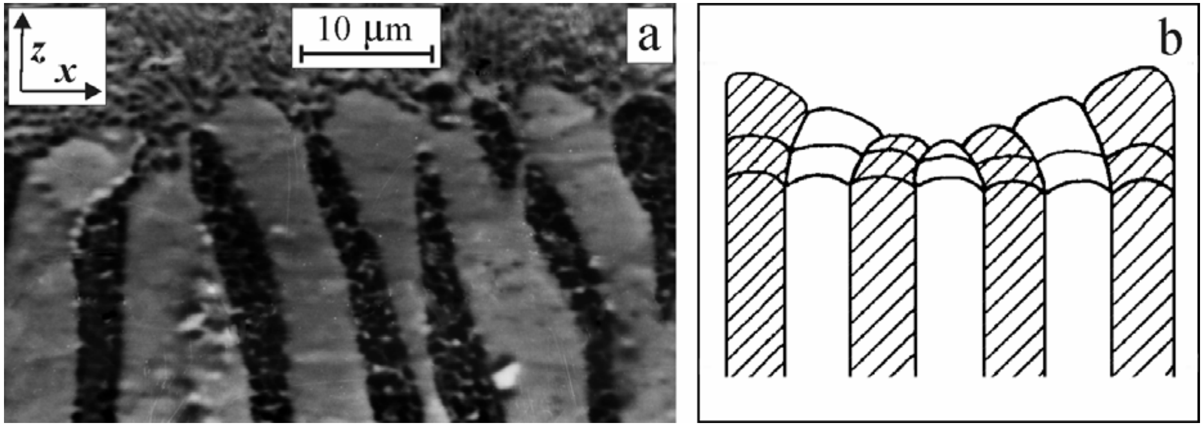
**d/ nieciągłość temperatury na granicy fazowej $\alpha$ / $\beta$**

**e/ nierealistyczna krzywizna frontu krystalizacji**

K.A. Jackson, J.D. Hunt, Trans. AIME, **236**, 1129-1142, (1966)

# Niestabilność frontu krystalizacji wynikająca z teorii Jacksona-Hunta

**zgodnie ze schematem na RYS. 3a pewne obszary fazy α powinny rosnąć z fazy ciekłej o stężeniu składnika właściwym raczej dla formowania się fazy β**
**to mogłoby prowadzić do zmian odległości międzypłytkowej i niestabilności frontu krystalizacji**



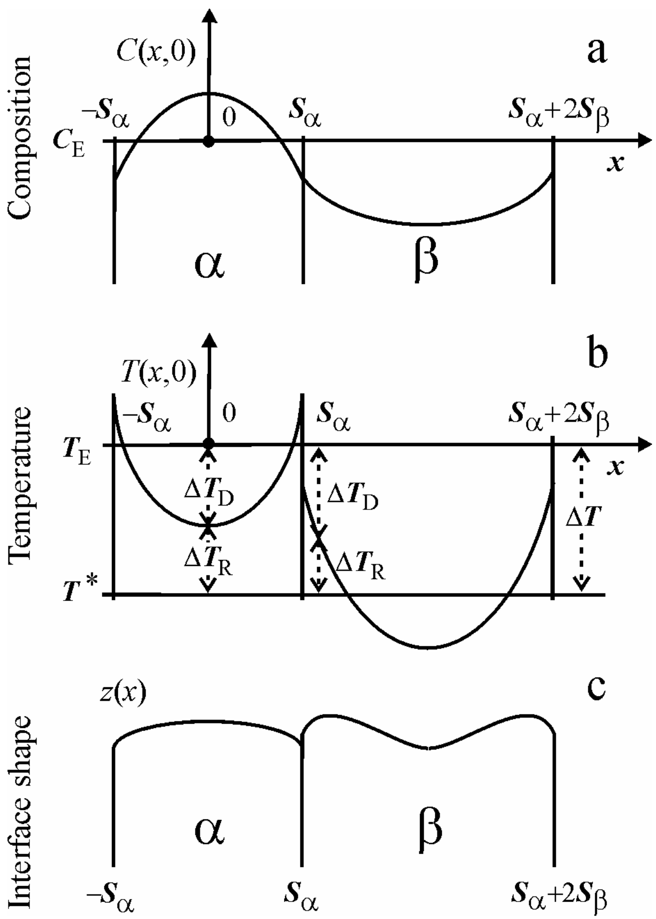

RYS. 4

**niestabilność frontu krystalizacji**
**a/ zaobserwowana podczas wzrostu kompozytu *in situ***
**b/ wnioskowana z teorii Jacksona-Hunta (jak wyżej)**

K.A. Jackson, J.D. Hunt, Trans. AIME, **236**, 1129-1142, (1966)

# Nierozdzielność mikropola stężenia według teorii Jacksona-Hunta




RYS.5

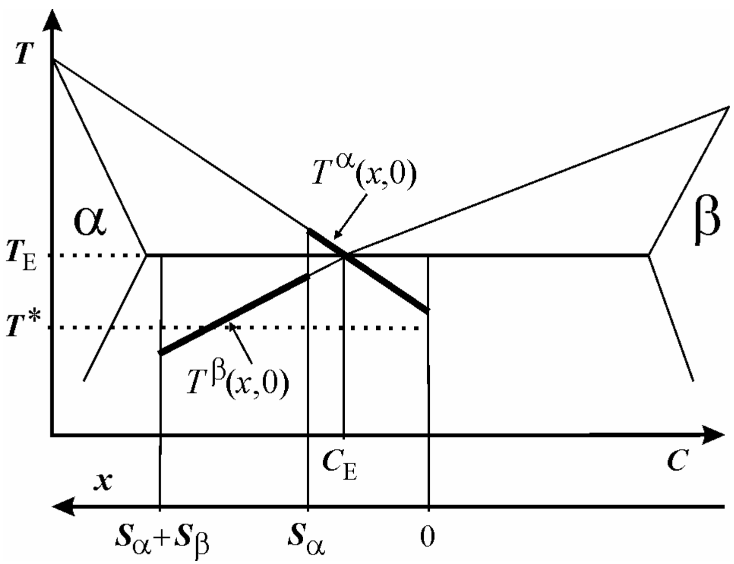
**zgodnie z rozwiązaniem równania dyfuzji w/g J-H profil stężenia jest wspólny dla obydwu płytek kompozytu *in situ***

**^założenie o nierozdzielności mikro-pola stężenia (w teorii Jacksona - Hunta)**
**wspólnie z koncepcją *idealnie sprzężonego wzrostu***
**$\Delta T_\alpha^* = \Delta T_\beta^* = \Delta T$ powoduje nieciągłość przechłodzenia na granicy faz α / β**
**^co więcej, pewne partie płytek fazy α jak też fazy β powinny rosnąć poza reżimem *idealnie sprzężonego wzrostu***

**przechłodzenie**
**$\Delta T_D$ wynika ze zmian stężenia składnika**
**$\Delta T_R$ wynika z krzywizny frontu krystalizacji**

K.A. Jackson, J.D. Hunt, Trans. AIME, **236**, 1129-1142, (1966)

# Odniesienie teorii Jacksona-Hunta do diagramu fazowego




RYS.6

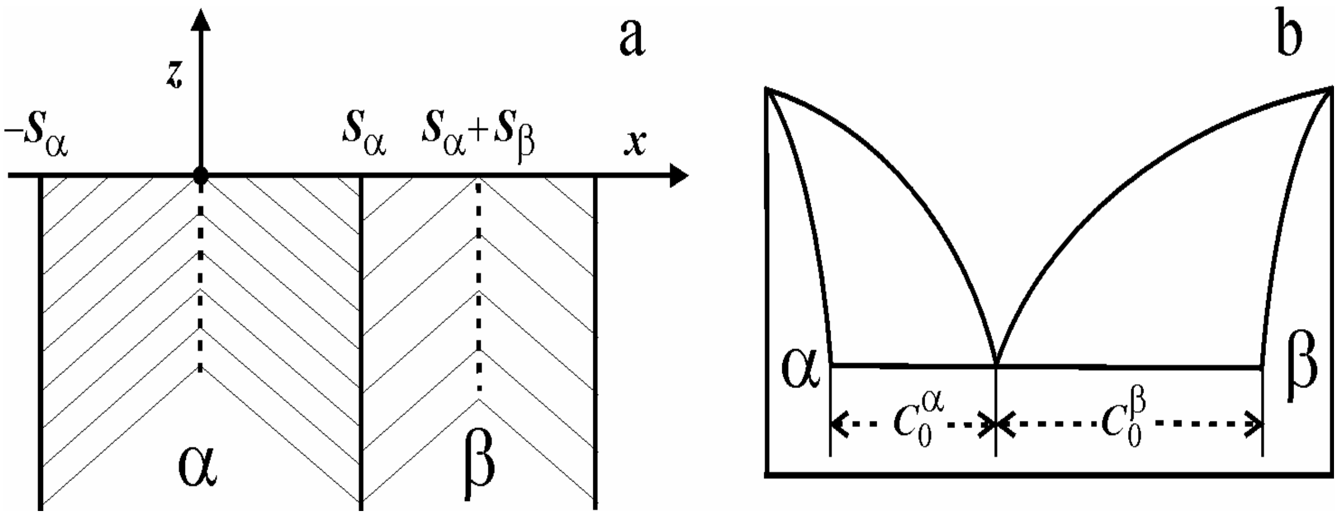
**przechłodzenie; diagram fazowy**

**przechłodzenie całkowite: $\Delta T = T^* - T_E$**

| | |
|---|---|
| **C** | **stężenie składnika** |
| **$C_E$** | **stężenie składnika w punkcie eutektycznym** |
| **$S_\alpha$** | **połowa szerokości płytki fazy α** |
| **$S_\beta$** | **połowa szerokości płytki fazy β** |
| **T** | **temperatura równowagowa** |
| **$T^\alpha(x,z)$** | **temperatura równowagowa odpowiadająca zmianom stężenia składnika na froncie krystalizacji fazy α, (z = 0)** |
| **$T^\beta(x,z)$** | **temperatura równowagowa odpowiadająca zmianom stężenia składnika na froncie krystalizacji fazy β, (z = 0)** |
| **$T^*$** | **temperatura rzeczywista frontu krystalizacji** |
| **$T_E$** | **temperatura przemiany eutektycznej** |

K.A. Jackson, J.D. Hunt, Trans. AIME, **236**, 1129-1142, (1966)

# Próba korekcji teorii Jacksona-Hunta




teraz

$$C_0^\alpha S_\alpha = C_0^\beta S_\beta$$

RYS. 7

**a/skorygowany płaski front krystalizacji**
**b/skorygowany diagram fazowy**

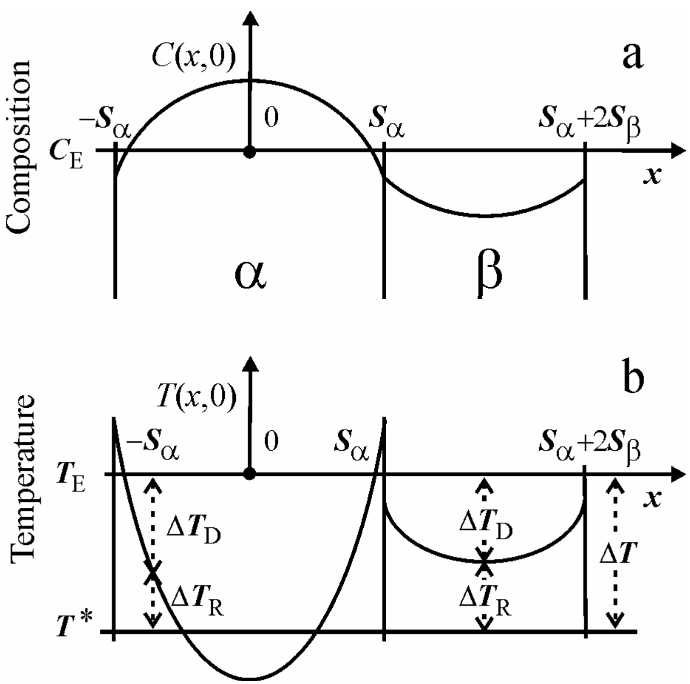
stąd

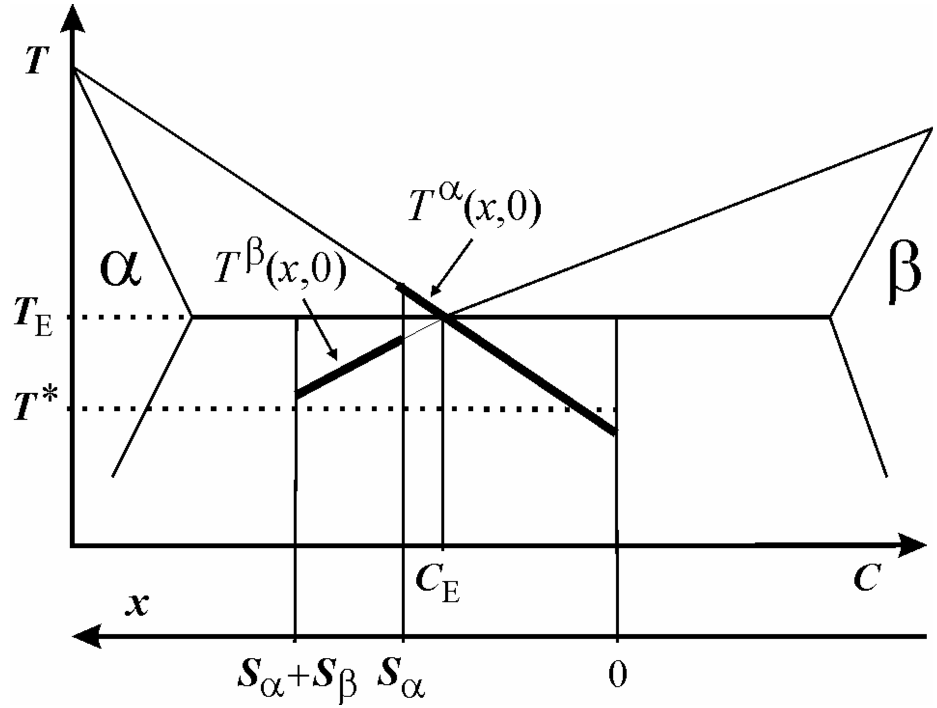
$$B_0 = \frac{C_0^\alpha S_\alpha - C_0^\beta S_\beta}{S_\alpha + S_\beta} = 0$$

$$C = C_E + C_\infty + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos\left(\frac{\pi n x}{S_\alpha + S_\beta}\right) \exp\left(-\frac{\pi n z}{S_\alpha + S_\beta}\right)$$

# Próba korekcji teorii Jacksona - Hunta
# Stężenie składnika i przechłodzenie




RYS. 8

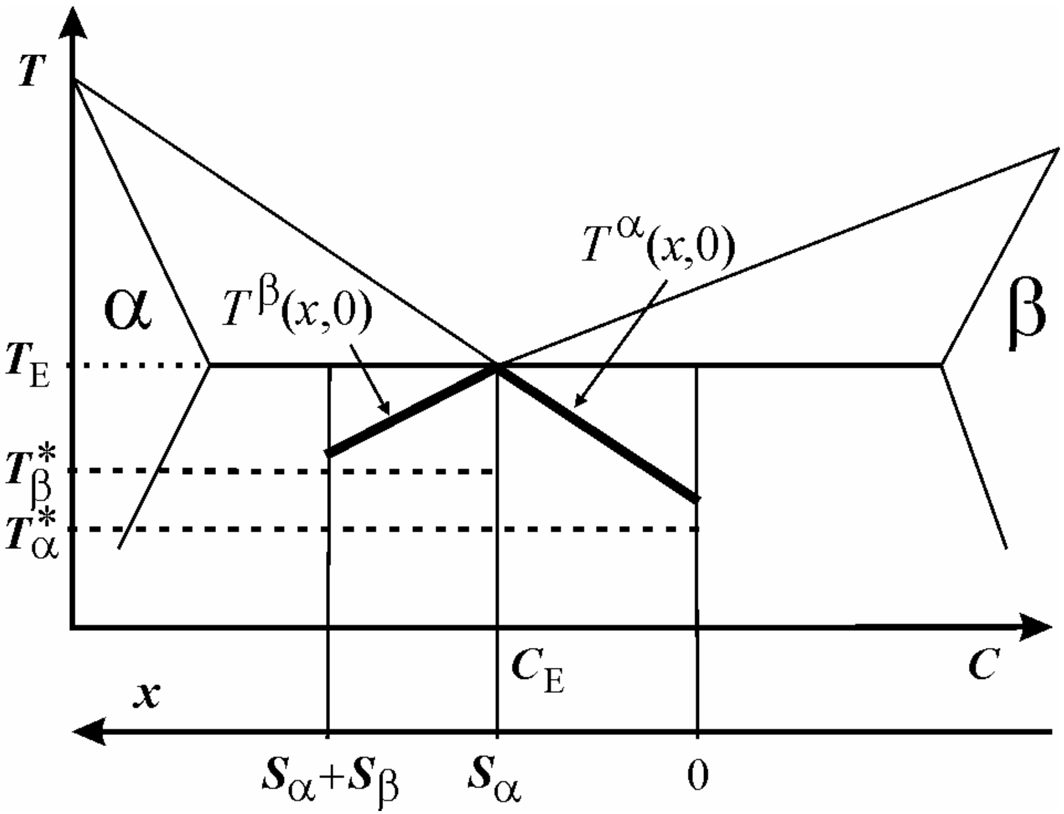
stężenie składnika i przechłodzenie

**brak istotnej poprawy teorii J-H ! – co pokazuje RYS. 9 (do porównania ze schematem na RYS. 6)**

RYS. 9

przechłodzenie; diagram fazowy

# Podstawy prezentowanego modelu
# Koncepcja *sprzężonego wzrostu*




***sprzężony wzrost*** **to nowa koncepcja by poprawić teorię J-H**

$$\Delta T^*_{\alpha} = T^*_{\alpha} - T_E$$

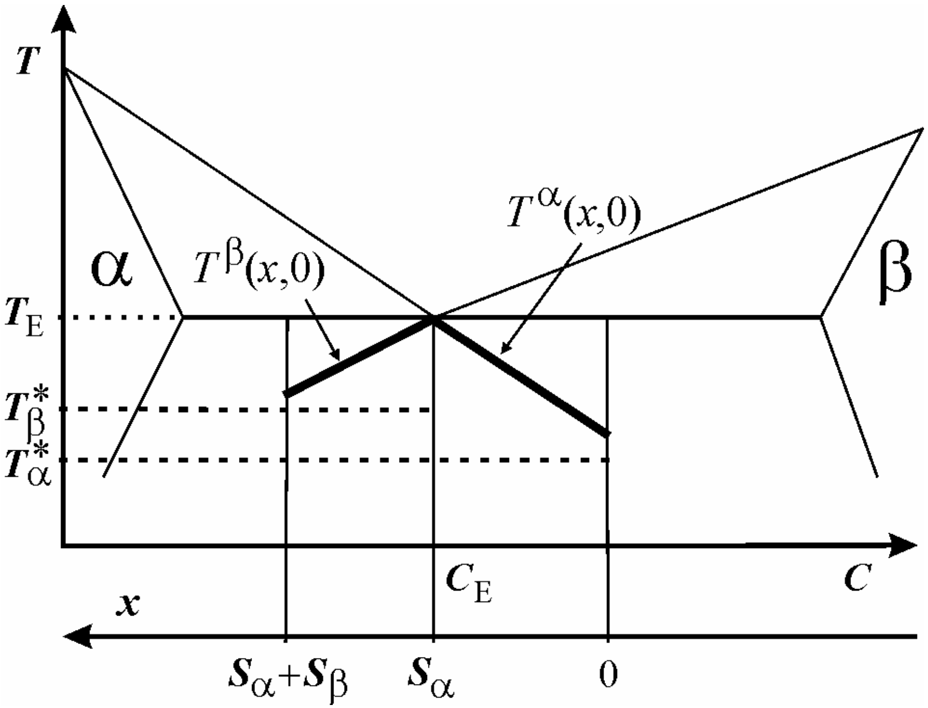
$$\Delta T^*_{\beta} = T^*_{\beta} - T_E$$

RYS. 10

**pożądana relacja: przechłodzenie diagram fazowy**

ale ogólnie ➔ $\Delta T_{\alpha}^{*} \neq \Delta T_{\beta}^{*}$

# Przechłodzenie frontu krystalizacji w świetle koncepcji *sprzężonego wzrostu*




**przechłodzenie krzywiznowe**

$$\delta T_R^{\alpha}(x,0)=T_\alpha^*-T^{\alpha}(x,0)$$

$$\delta T_R^{\beta}(x,0)=T_\beta^*-T^{\beta}(x,0)$$

**przechłodzenie – diagram fazowy**

przechłodzenie całkowite

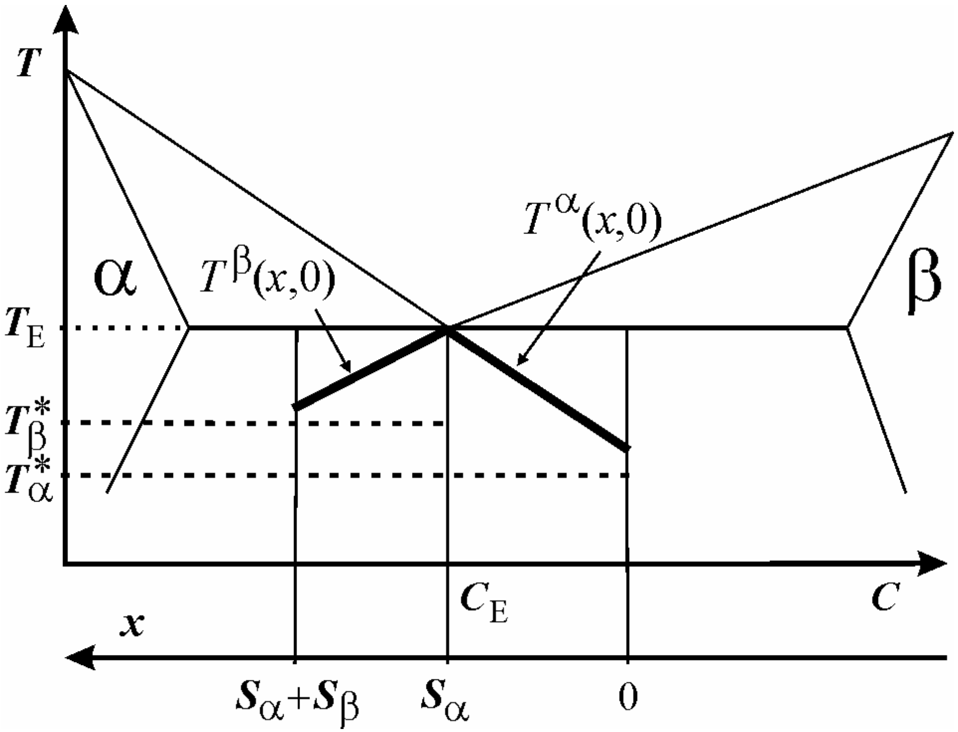
➔

$$\delta T^{\alpha}(x,0)+\delta T_R^{\alpha}(x,0)=\Delta T_\alpha^*$$

$$\delta T^{\beta}(x,0)+\delta T_D^{\beta}(x,0)=\Delta T_\beta^*$$

RYS. 11

# Stężenie składnika w świetle koncepcji *sprzężonego wzrostu*




$$\delta C^{\alpha}(x,0)=C^{\alpha}(x,0)-C_E$$

$$\delta C^{\beta}(x,0)=C^{\beta}(x,0)-C_E$$

**przechłodzenie – diagram fazowy**

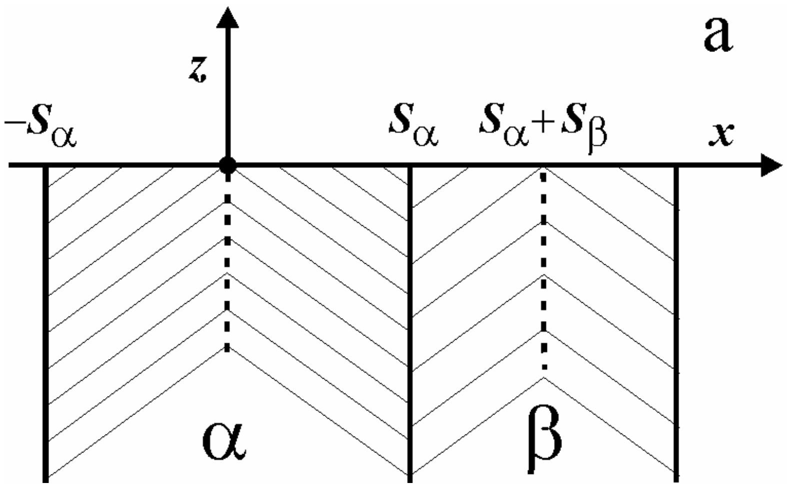
RYS. 12

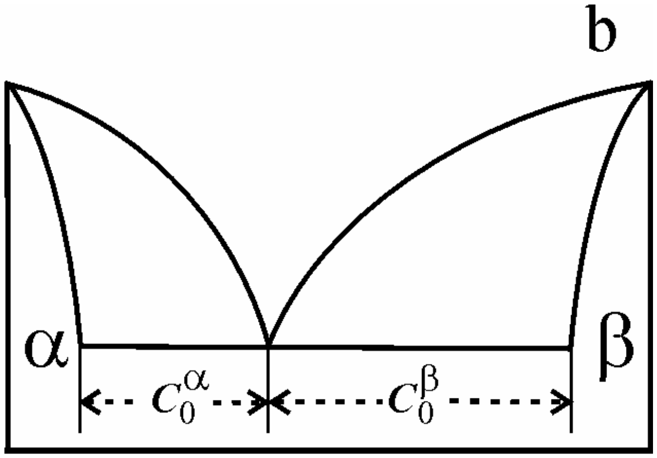
*w konsekwencji* ➔

$$C_0^{\alpha}(S_\alpha,0)=C_S^{\alpha}(S_\alpha,0)-C_E<0$$

$$C_0^{\beta}(S_\alpha,0)=C_S^{\beta}(S_\alpha,0)-C_E>0$$

# Podstawy nowego rozwiązania w świetle koncepcji *sprzężonego wzrostu*




RYS. 13

*a/ płaski front krystalizacji*
*b/ odpowiadający mu diagram fazowy*

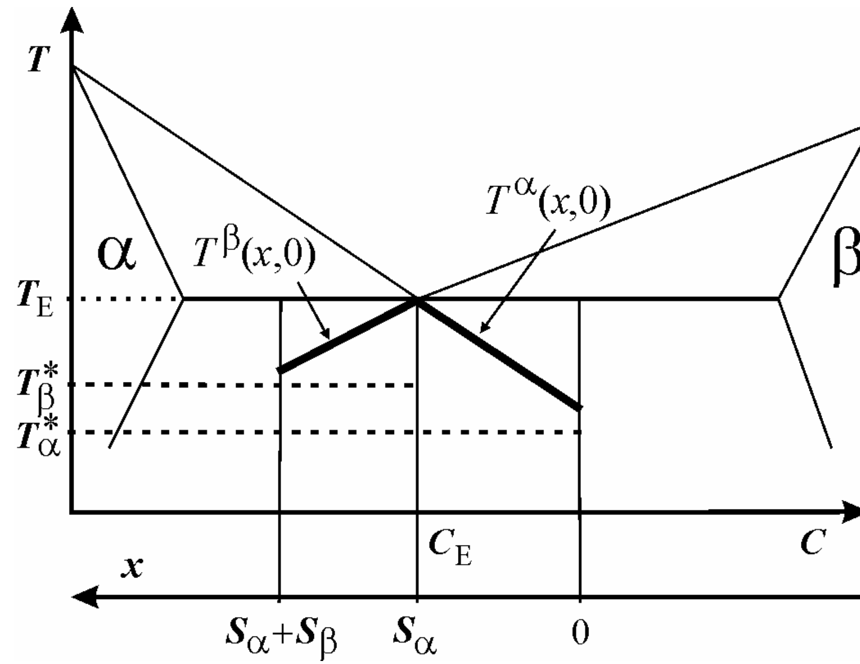
$$C_0^\alpha(S_\alpha,0)=C_S^\alpha(S_\alpha,0)-C_E<0$$

$$C_0^\beta(S_\alpha,0)=C_S^\beta(S_\alpha,0)-C_E>0$$

# Równanie dyfuzji w świetle koncepcji *sprzężonego wzrostu*

RYS. 14

*przechłodzenie – diagram fazowy*




**równanie dyfuzji:**

$$\frac{\partial^2 \delta C}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \delta C}{\partial z^2}+\frac{v}{D}\frac{\partial \delta C}{\partial z}=0$$

*wraz z*

$$\delta C\left(S_\alpha, z\right)=C\left(S_\alpha, z\right)-C_E=0$$

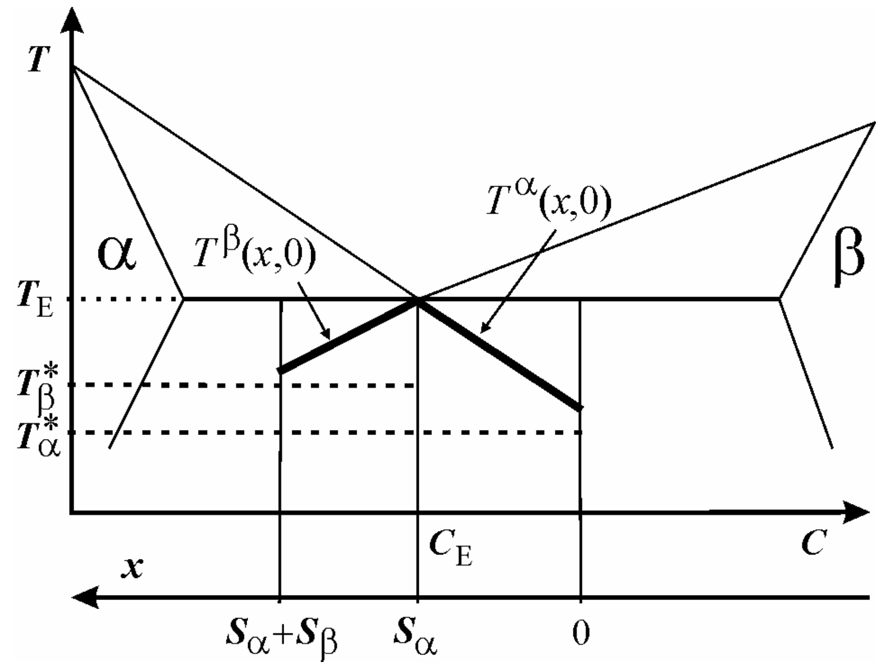
# Założenia dla nowego rozwiązania równania dyfuzji

RYS. 15

*przechłodzenie; diagram fazowy*

**równanie dyfuzji:**

$$\frac{\partial^2 \delta C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta C}{\partial z^2} + \frac{v}{D}\frac{\partial \delta C}{\partial z} = 0$$




***należy rozwiązać równanie dyfuzji w taki sposób aby:***
***a/ uwzględnić zachowanie frontu krystalizacji (zdefiniowane; RYS. 15)***
***b/ uzyskać rozwiązanie oddzielnie dla płytki fazy $\alpha$ i płytki fazy $\beta$***

# Ogólne rozwiązanie równania dyfuzji

**równanie dyfuzji:**

$$\frac{\partial^2 \delta C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \delta C}{\partial z^2} + \frac{v}{D}\frac{\partial \delta C}{\partial z} = 0$$

***ogólne rozwiązanie równania dyfuzji sformułowanego stosownie do koncepcji sprzężonego wzrostu jest dane iloczynem dwu funkcji:***

$$\delta C(x,z) = X(x)\,Z(z)$$

# Rozwiązanie równania dyfuzji
# Sformułowania szczegółowe

***ogólne rozwiązanie równania dyfuzji sformułowane stosownie do koncepcji sprzężonego wzrostu jest dane następująco:***

$$\delta C(x,z) = X(x)\, Z(z)$$

***gdzie***

$$X(x) = A\cos(\omega x) + B\sin(\omega x)$$

$$Z(z) = \exp\left[\left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \omega^2}\right) z\right]$$

**A, B, ω – parametery, które należy zdefiniować**

# Definicja szukanych parametrów

**A, B, $\omega$ – parametry, które należy zdefiniować**

definicje powinny być dane oddzielnie

a/ dla płytki fazy $\alpha$ $x \in [0, S_\alpha]$ $z \geq 0$

**wartości B oraz $\omega$ wynikają z warunków a/ oraz b/:**

a/ $\left.\dfrac{\partial \delta C(x,z)}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$ oraz b/ $\delta C(S_\alpha, z) = 0$

z a/ $-\omega A \sin(\omega \cdot 0) + \omega B \cos(\omega \cdot 0) = 0$ wynika $B = 0$

z a/ oraz b/ $A \cos(\omega S_\alpha) = 0$

a także $\omega = \omega_{2n-1} = \dfrac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha}, \quad n = 1,2,\ldots$

# Szczegółowe rozwiązanie równania dyfuzji

a/ dla płytki fazy $\alpha$ $x \in [0, S_\alpha]$ $z \geq 0$

**szczegółowe rozwiązanie jest, jak następuje:**

$$\delta C(x,z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2S_\alpha}\right) \exp\left[\left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left(\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha}\right)^2}\right) z\right]$$

gdzie $A_{2n-1}$ są stałymi

# Krystalizacja wolna
# Rozwiązanie równania dyfuzji

jest oczywistym, że dla krystalizacji wolnej:

$$\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha} >> \frac{v}{2D}$$

a/ dla płytki fazy α $x \in [0, S_\alpha]$ $z \geq 0$

$$\delta C(x,z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2S_\alpha}\right) \exp\left[\left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left(\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha}\right)^2}\right) z\right]$$

redukuje się do

$$\delta C(x,z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2S_\alpha}\right) \exp\left(-\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha} z\right)$$

# Parametry $A_{2n-1}$

wartości parametrów $A_{2n-1}$ są obliczone po zastosowaniu warunku:

$$\left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = f_\alpha(x); \quad f_\alpha(x) < 0, \quad x \in [0, S_\alpha]$$

*dla*

a/ mikro-pola stężenia składnika dla krystalizacji szybkiej

$$\left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1}\left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left(\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha}\right)^2}\right)\cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)$$

b/ mikro-pola stężenia składnika dla krystalizacji wolnej

$$\left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1}\left(-\frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha}\right)\cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)$$

# Zastosowanie funkcji f(x)

dodatkowo, wprowadzona zostaje nowa funkcja f(x):

$$f(x), \quad -2S_\alpha \le x \le 2S_\alpha, \quad f(-x) = f(x), \quad f(x+2S_\alpha) = -f(x)$$

zastosowanie znajduje następująca własność funkcji f(x)

$$f(x) \approx \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{2S_\alpha}\right)$$

gdzie

$$a_n = \frac{1}{S_\alpha} \int_0^{2S_\alpha} f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{2S_\alpha}\right) dx$$

# f(x)

ponieważ: $f(x+2S_\alpha) = -f(x)$ dla $n = 2k$ $k = 0, 1, 2, \ldots$

zatem:

$$a_{2k} = \frac{1}{S_\alpha}\int_0^{2S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{S_\alpha}^{2S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{-S_\alpha}^{0} f(x+2S_\alpha)\cos\left(\frac{2k\pi(x+2S_\alpha)}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx - \int_{-S_\alpha}^{0} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{0}^{-S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{0}^{S_\alpha} f(-x)\cos\left(\frac{-2k\pi x}{2S_\alpha}\right)d(-x)\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx - \int_{0}^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{2k\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) = 0$$

# f(x)

ponieważ: $f(x+2S_\alpha) = -f(x)$ dla $n = 2k-1,\ k = 1,2,\ldots$

zatem:

$$a_{2k-1} = \frac{1}{S_\alpha}\int_0^{2S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{S_\alpha}^{2S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{-S_\alpha}^{0} f(x+2S_\alpha)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi(x+2S_\alpha)}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx - \int_{-S_\alpha}^{0} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha} + 2k\pi + \pi\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx + \int_{-S_\alpha}^{0} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx - \int_{0}^{-S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx\right) =$$

$$\frac{1}{S_\alpha}\left(\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx - \int_{0}^{S_\alpha} f(-x)\cos\left(\frac{-(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)d(-x)\right) =$$

$$\frac{2}{S_\alpha}\int_0^{S_\alpha} f(x)\cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_\alpha}\right)dx$$

# Wynik zastosowania funkcji f(x)

jeśli przyjąć: $f(x+2S_{\alpha}) = -f(x)$

to wtedy $a_{2k} = 0$ $k = 0, 1, 2, \ldots$ dla $n = 2k$

oraz

$$a_{2k-1} = \frac{2}{S_{\alpha}} \int_{0}^{S_{\alpha}} f(x) \cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_{\alpha}}\right) dx$$

dla $n = 2k-1, k = 1,2,\ldots$

ostatecznie, szereg *Fouriera* dla f(x) jest:

$$f(x) \approx \sum_{k=1}^{\infty} a_{2k-1} \cos\left(\frac{(2k-1)\pi x}{2S_{\alpha}}\right)$$

# Ostateczna definicja parametrów $A_{2n-1}$

dla krystalizacji szybkiej:

$$A_{2n-1} = \left( -\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left( \frac{(2n-1)\pi}{2S_\alpha} \right)^2} \right)^{-1} \frac{2}{S_\alpha} \int_0^{S_\alpha} f_\alpha(x) \cos\left( \frac{(2n-1)\pi\, x}{2S_\alpha} \right) dx$$

$$n = 1, 2, \ldots$$

dla krystalizacji wolnej:

$$A_{2n-1} = -\frac{4}{(2n-1)\pi} \int_0^{S_\alpha} f_\alpha(x) \cos\left( \frac{(2n-1)\pi\, x}{2S_\alpha} \right) dx$$

$$n = 1, 2, \ldots$$

# Własności rozwiązania równania dyfuzji

$$\left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial x}\right|_{x=2S_\alpha} = 0$$

$$x \in \left[0, S_\alpha\right]$$

$$\left.\frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial z}\right|_{z=0} = f_\alpha(x) = f_\alpha(-x) = -f_\alpha(-x+2S_\alpha) = -\left.\frac{\partial \delta C(-x+2S_\alpha, z)}{\partial z}\right|_{z=0}$$

zgodnie z założeniem:

$$f_\alpha(-x) = f_\alpha(x), \qquad f_\alpha(x+2S_\alpha) = -f_\alpha(x)$$

# Rozwiązanie równania dyfuzji

b/ dla płytki fazy β

$$x \in \left[S_\alpha, S_\alpha + S_\beta\right] \qquad z \geq 0$$

krystalizacja szybka

$$\delta C(x,z) =$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} B_{2n-1} \cos\left(\frac{(2n-1)\pi(x - S_\alpha + S_\beta)}{2S_\beta}\right) \exp\left[\left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left(\frac{(2n-1)\pi}{2S_\beta}\right)^2}\right) z\right]$$

przy

$$B_{2n-1} = \left(-\frac{v}{2D} - \sqrt{\frac{v^2}{4D^2} + \left(\frac{(2n+1)\pi}{2S_\beta}\right)^2}\right)^{-1}$$

$$\frac{2}{S_\beta} \int_{S_\alpha - S_\beta}^{S_\alpha} f_\beta(x) \cos\left(\frac{(2n+1)\pi(x - S_\alpha + S_\beta)}{2S_\beta}\right) dx$$

# Rozwiązanie równania dyfuzji

b/ dla płytki fazy β

$$x \in \left[ S_\alpha , S_\alpha + S_\beta \right] \qquad z \geq 0$$

krystalizacja wolna

$$\delta C(x,z) = \sum_{n=1}^{\infty} B_{2n-1} \cos\left( \frac{(2n-1)\pi (x - S_\alpha + S_\beta)}{2 S_\beta} \right) \exp\left( -\frac{(2n-1)\pi}{2 S_\beta} z \right)$$

$$B_{2n-1} = -\frac{4}{(2n-1)\pi} \int\limits_{S_\alpha - S_\beta}^{S_\alpha} f_\beta(x) \cos\left( \frac{(2n-1)\pi (x - S_\alpha + S_\beta)}{2 S_\beta} \right) dx$$

$n = 1, 2, \ldots$

natomiast

$$\left. \frac{\partial \delta C(x,z)}{\partial z} \right|_{z=0} = f_\beta(x), \qquad x \in [0, S_\beta]$$

# Prezentacja rozwiązania równania dyfuzji

a/ dla płytki fazy $\alpha$

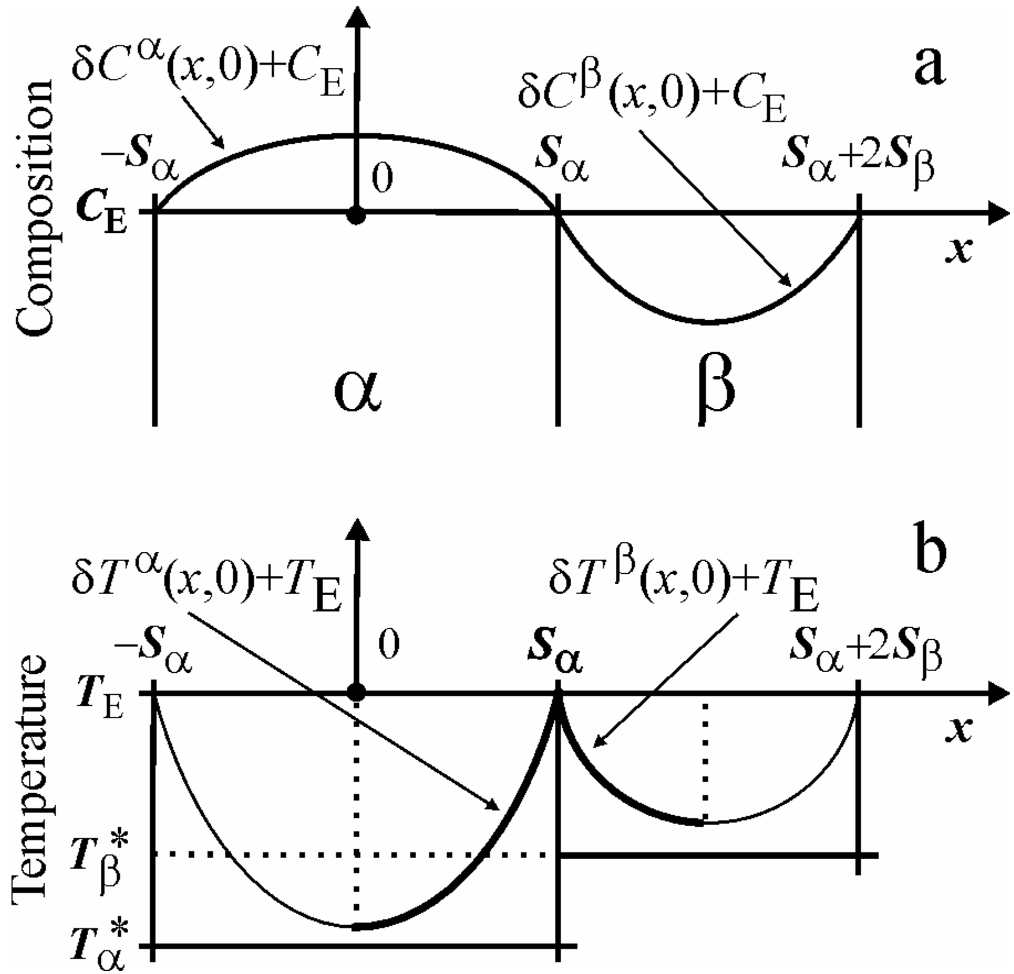
$x \in [0, S_\alpha]$ $z = 0$

b/ dla płytki fazy $\beta$

$x \in [S_\alpha, S_\alpha + S_\beta]$ $z = 0$

RYS. 16

mikro-pole stężenia składnika przechłodzenie



# Globalny bilans masy dla mikro-pola stężenia składnika

$$\int_0^{\infty}\int_0^{S_\alpha}\delta C(x,z)\,dx\,dz+\int_0^{\infty}\int_{S_\alpha}^{S_\alpha+S_\beta}\delta C(x,z)\,dx\,dz+=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{4(-1)^{n-1}D}{(2n-1)\pi}$$

$$\left(\frac{A_{2n-1}\,S_\alpha^2}{vS_\alpha+\sqrt{v^2S_\alpha^2+(2n-1)^2D^2\pi^2}}-\frac{B_{2n-1}\,S_\beta^2}{vS_\beta+\sqrt{v^2S_\beta^2+(2n-1)^2D^2\pi^2}}\right)=0$$

$$B_{2n-1}=\frac{A_{2n-1}\,S_\alpha^2\left(vS_\beta+\sqrt{v^2S_\beta^2+(2n-1)^2D^2\pi^2}\right)}{S_\beta^2\left(vS_\alpha+\sqrt{v^2S_\alpha^2+(2n-1)^2D^2\pi^2}\right)},\quad n=1,2,\ldots$$

dla krystalizacji szybkiej ↑

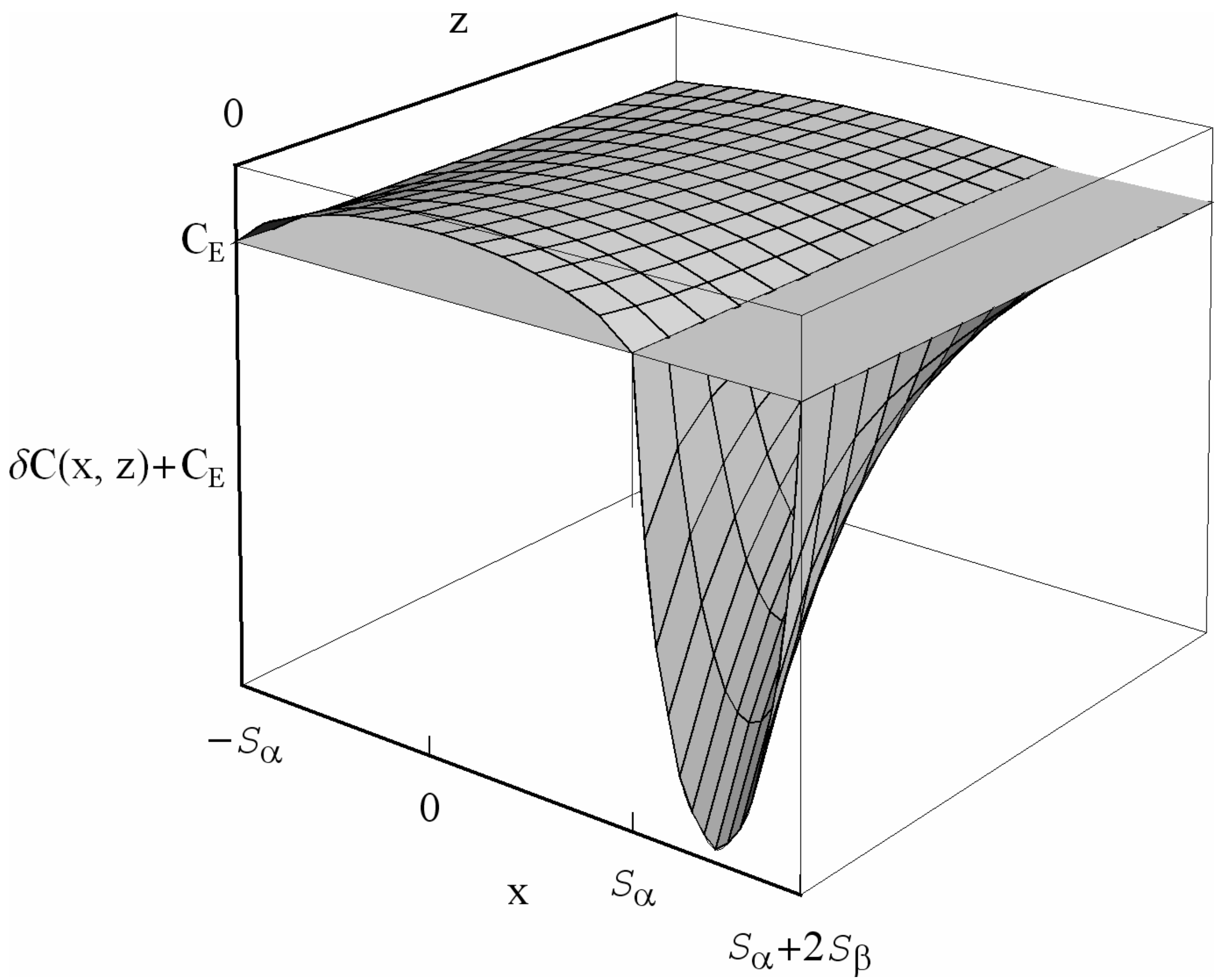
dla krystalizacji wolnej →

$$B_{2n-1}=A_{2n-1}\left(\frac{S_\alpha}{S_\beta}\right)^2,\quad n=1,2,\ldots$$

# Wizualizacja globalnego bilansu masy dla mikro-pola stężenia składnika

RYS. 17

**bilans masy obliczony dla płaskiego frontu krystalizacji**



# Lokalny bilans masy dla mikro-pola stężenia składnika

lokalny bilans masy jest spełniony przy z = 0 dla płytki fazy $\alpha$ oraz przy z = d dla płytki fazy $\beta$

$$\int_{0}^{S_\alpha} \delta C(x,0)\,dx + \int_{S_\alpha}^{S_\alpha+S_\beta} \delta C(x,d)\,dx = 0$$

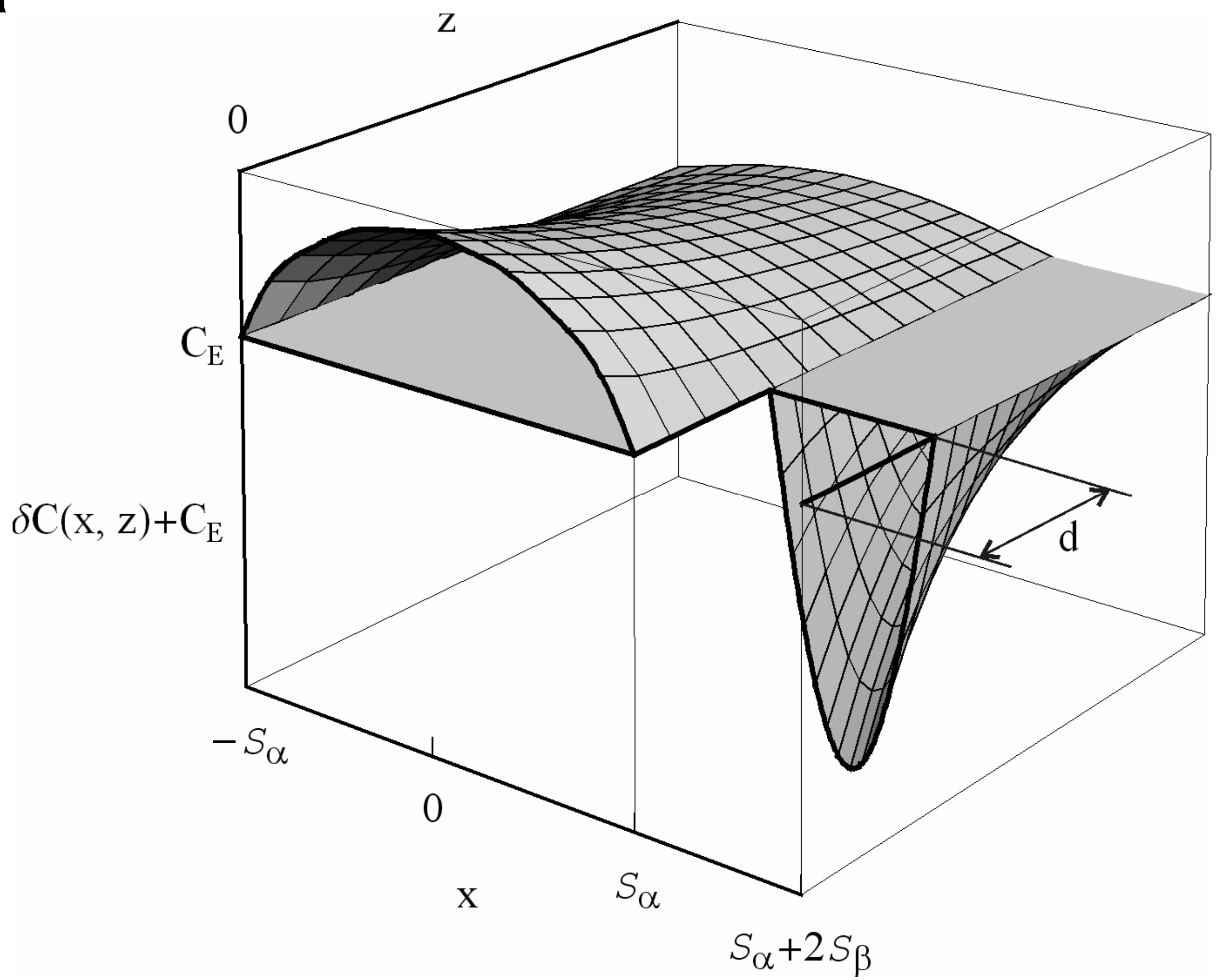
po pewnych przekształceniach

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1}\frac{2S_\alpha(-1)^{n-1}}{(2n-1)\pi} - \sum_{n=1}^{\infty} B_{2n-1}\frac{2S_\beta(-1)^{n-1}}{(2n-1)\pi}\exp\left(-\frac{vS_\beta+\sqrt{v^2S_\beta^2+(2n-1)^2D^2\pi^2}}{2DS_\beta}d\right) = 0$$

**d - wyprzedzenie fazowe**

# Wizualizacja graficzna lokalnego bilansu masy dla mikro-pola stężenia składnika

RYS. 18




**wyprzedzenie, d, jest fazą przejściową; posiada własności fazy ciekłej ale strukturę fazy stałej**

# Definicja wyprzedzenia fazowego

**krystalizacja szybka**

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \frac{(-1)^{n-1}}{(2n-1)} \times$$
$$\left(1 - \frac{S_\alpha \left(vS_\beta + \sqrt{v^2 S_\beta^2 + (2n-1)^2 D^2 \pi^2}\right)}{S_\beta \left(vS_\alpha + \sqrt{v^2 S_\alpha^2 + (2n-1)^2 D^2 \pi^2}\right)} \exp\left(-\frac{vS_\beta + \sqrt{v^2 S_\beta^2 + (2n-1)^2 D^2 \pi^2}}{2DS_\beta} d\right)\right)$$
$$= 0$$

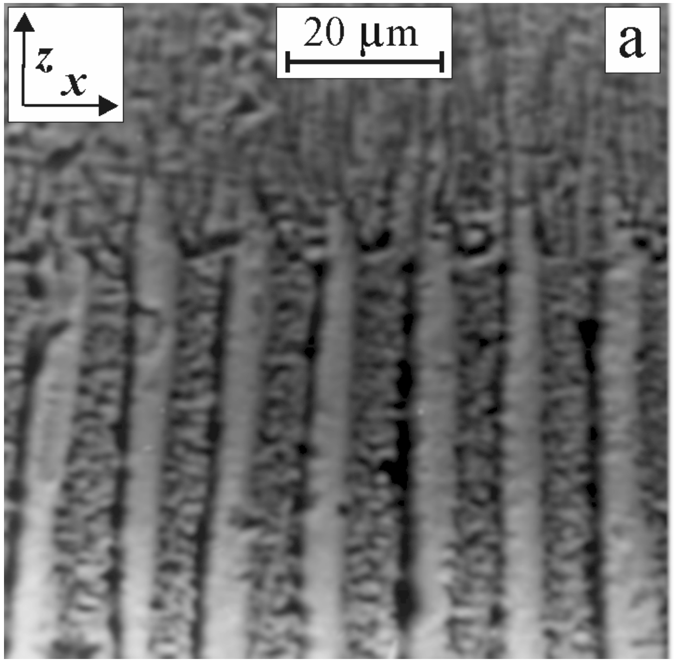
**krystalizacja wolna**

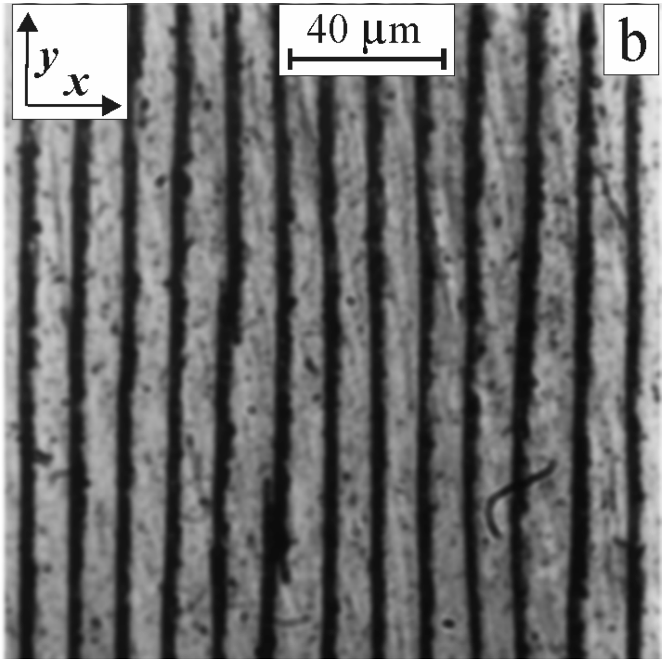
$$\sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \frac{(-1)^{n-1}}{(2n-1)} \left(1 - \frac{S_\alpha}{S_\beta} \exp\left(-\frac{(2n-1)\pi}{2S_\beta} d\right)\right) = 0$$

# Potwierdzenie istnienia wyprzedzenia fazowego

RYS. 19

zorientowany
wzrost
kompozytu
*in situ*
(Pb) – (Cd)




**widoczne wyprzedzenie fazowe na zamrożonym froncie krystalizacji, RYS. 19a** **faza wiodąca – faza (Cd)**

# Bilans masy dla granicy międzyfazowej $\alpha$ / $\beta$

bilans masy dla frontu krystalizacji wymaga aby

$$S_\alpha \frac{\partial \delta C^\alpha(x,0)}{\partial z} = S_\alpha \frac{v}{D}(1-k_\alpha)C^\alpha(x,0) \qquad x \in [0, S_\alpha]$$

$$S_\beta \frac{\partial \delta C^\beta(x,d)}{\partial z} = S_\beta \frac{v}{D}(1-k_\beta)C^\beta(x,d) \qquad x \in [S_\alpha, S_\alpha + S_\beta]$$

**bilans masy dla granicy międzyfazowej $\alpha$ / $\beta$ może być zapisany jako:**

$$\lim_{x\to S_\alpha^-} S_\alpha \frac{\partial \delta C^\alpha(x,0)}{\partial z} + \lim_{x\to S_\alpha^+} S_\beta \frac{\partial \delta C^\beta(x,d)}{\partial z} =$$

$$S_\alpha \frac{v}{D} C_0^\alpha(S_\alpha,0) + S_\beta \frac{v}{D} C_0^\beta(S_\alpha,d) = \frac{v}{D}\Big(S_\alpha C_0^\alpha(S_\alpha,0) + S_\beta C_0^\beta(S_\alpha,d)\Big) = 0$$

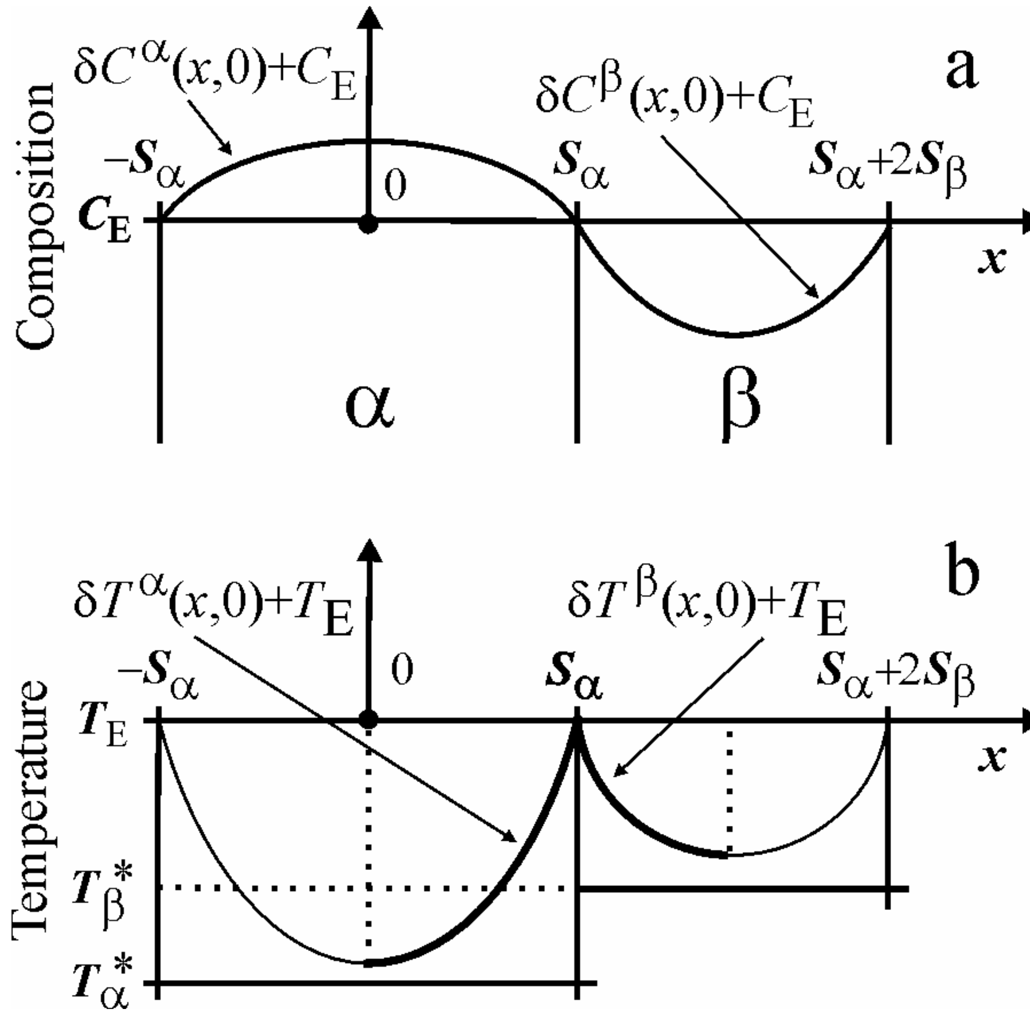
# Potrójny punkt frontu krystalizacji

nie tylko
jest spełniona
równowaga mechaniczna
ale także
równowaga termodynamiczna
w potrójnym punkcie
frontu krystalizacji

**mikro-pole stężenia składnika istnieje w fazie przejściowej, d (tuż ponad fazą wiodącą) tak jakby to była faza ciekła**

RYS. 20

stężenie składnika
przechłodzenie



# Uwagi końcowe

**dla wolnej krystalizacji, typowej dla wzrostu kompozytu *in situ***

$$B_{2n-1} = A_{2n-1}\left(\frac{S_\alpha}{S_\beta}\right)^2, \quad n = 1,2,\ldots$$

$$\left| f_\beta\left(x\frac{S_\beta}{S_\alpha}\right)\right| = \left| f_\alpha(x)\right|\left(\frac{S_\alpha}{S_\beta}\right)^2$$

***prezentowany opis mikro-pola stężenia składnika może być matematycznie zredukowany do równania Jacksona Hunta, jednakże pod warunkiem, że diagram fazowy byłby symetryczny co oznacza, że $C_0^\alpha = C_0^\beta$ a w konsekwencji $S_\alpha = S_\beta$ dodatkowo, wyprzedzenie fazowe staje się równe zeru, d =0, wtedy też $C_E$, wraca do granicy fazowej $\alpha / \beta$ , a bilans masy staje się spełniony dla każdej współrzędnej, z***

METRO
MEtalurgiczny TRening *On-line*

# Transport masy przed frontem krystalizacji kompozytu *in situ*

Koniec wykładu

Edukacja i Kultura