

Modelování vícesložkové difúzní fázové transformace v pevných látkách

Jiří Vala, Fakulta stavební VUT v Brně

Difúzi v systémech o konečném počtu složek lze charakterizovat:

- mechanismem pohybu vakancí pro „pomalou“ difúzi substitučních složek,
- procesem nerovnoměrného generování a anihilace vakancí,
- „rychlou“ difúzí atomů intersticiálních složek.

Pro věrohodnou numerickou simulaci difúzní fázové transformace je potřebné řešit sdružený problém difúze a pohybu mezifázového rozhraní, jenž zahrnuje a), b) i c) ve všech svých fázích. Běžné modely (nehledě na další zjednodušení) většinou pracují s ostrým mezifázovým rozhraním (tj. s rozhraním nekonečně malé tloušťky), a neobejdou se tak bez dodatečných podmínek rovnováhy formulovaných pro takové ideální rozhraní. Ucelená fyzikální i matematická teorie je dosud zpracována jen pro modelové binární (dvousložkové) systémy.

Nový vícesložkový model, navržený v rámci řešení projektu GA AV ČR *Modelování kinetiky fázových transformací v pevných látkách*, uvažuje pohybující se rozhraní konečné tloušťky h . Jeho odvození vychází z Onsagerova termodynamického principu, zejména z vyčíslení celkové Gibbsovy a disipační energie na rozhraní. Koncentraci jednotlivých složek v každé poloze x lze charakterizovat r molárními podíly c_k pro $k \in \{1, \dots, r\}$, jež odpovídají substitučním složkám, splňujícím podmínku $c_1 + \dots + c_r = 1$, a s molárními podíly c_k pro $k \in \{r + 1, \dots, r + s\}$, jež odpovídají intersticiálním složkám; zkráceně $c = (c_1, \dots, c_{r+s})$. Dalšími proměnnými v systému jsou 3 složky rychlosti $v = (v_1, v_2, v_3)$ a rovněž $3(r + s)$ složek difúzních toků j_{kp} , $k \in \{1, \dots, r + s\}$, $p \in \{1, 2, 3\}$. Budiž Ω molární objem. V pohyblivé soustavě souřadnic, kde tečky naznačují parciální derivování podle času, lze zachování hmotnosti pro libovolnou složku k formulovat ve tvaru

$$\dot{c}_k - v_p \nabla_p c_k = -\Omega \nabla_p j_{kp};$$

zde p jsou Einsteinovy sčítací indexy z $\{1, 2, 3\}$, obdobně použijeme i indexy k, l z $\{1, \dots, r + s\}$. Z Onsagerova principu vyplývá

$$j_{kp} = -\rho_{kl} \nabla_p \mu_l(c)$$

pro jisté materiálové charakteristiky ρ_{kl} a chemické potenciály μ_l . Máme nyní $4(r + s)$ rovnic o $4(r + s) + 3$ neznámých. Pro kompletování soustavy potřebujeme vyjádřit složky rychlosti v_p jako funkce c , zřejmě opět pomocí $\mu_l(c)$: ke klasickým členům typu $\nabla_p \mu_l(c)$ se připojují další (s nulovou divergencí), zohledňující mechanismus b). Pouze $r + s - 1$ složek c je nezávislých; i počet rovnic lze tedy snížit o jednu.

Zajímavé výsledky poskytuje už numerické modelování pohybujícího se rozhraní konstantní tloušťky v uzavřeném tříslložkovém systému, idealizovaném jako jednorozměrném, v němž dominuje Fe nad Cr a Ni. Pracuje se přitom pouze se dvěma fázemi a s jejich rozhraním jako s třetí fází (pro $0 \leq x \leq h$). Numerická simulace tohoto procesu v MATLABu je schopna vystihnout některé jevy, např. závislost rychlosti pohybu rozhraní na teplotě, resp. přechod od kvazistacionárního procesu k evoluční redistribuci c v jednotlivých fázích, lépe než dosud používané zjednodušené modely s ostrým rozhraním.