Вестник Челябинского государственного университета. 2012. № 30 (284).
Физика. Вып. 14. С. 54–58.

Ш. Ш. Ягафаров, И. С. Гаузин

СКОРОСТЬ РОСТА ЧАСТИЦ ПРИ ОСТВАЛЬДОВСКОМ СОЗРЕВАНИИ В СИСТЕМАХ С КОНЕЧНОЙ ОБЪЕМНОЙ ДОЛЕЙ ВЫДЕЛЕНИЙ ВТОРОЙ ФАЗЫ

Исследовано влияние объемной доли частиц второй (конденсированной) фазы при оствальдовском созревании. Показано, что при детерминированном массопереносе скорость роста частиц не зависит от величины объемной доли. Кубический закон роста среднего радиуса частиц сохраняется при увеличении объемной доли.

Ключевые слова: *оствальдовское созревание, объемная доля, численное моделирование.*

1. Введение

Лифшиц и Слезов [1] и независимо от них Вагнер [2] построили теорию, известную как теория ЛСВ, описывающую оствальдовское созревание в приближении нулевой объемной доли частиц второй фазы. Теория ЛСВ предсказывает, что средний радиус частиц изменяется со временем по закону $\overline{R}^3 \sim t$. В ряде экспериментальных исследований [3–4] была подтверждена кубическая зависимость среднего размера частиц от времени. Вместе с тем, имеются работы [5–7], в которых была получена отличная от кубической кинетика увеличения среднего радиуса в системах с конечной объемной долей частиц второй фазы. В ряде аналитических и модельных работ была предпринята попытка учесть влияние объемной доли выделений второй фазы на оствальдовское созревание [8–10]. Однако единого мнения о влиянии объемной доли на процесс роста частиц в настоящее время нет.

Нами рассмотрено оствальдовское созревание в двухфазной системе с ненулевой объемной долей частиц второй фазы. Построенная численная модель позволяет отслеживать поведение каждой частицы в системе.

2. Модель оствальдовского созревания

Моделируемая система представляет собой матричную фазу с размещенными в ней частицами второй фазы. Начальное распределение частиц по массам (за единицу массы выбирается «условный атом») имеет максимум, приходящийся на среднюю массу. Слева и справа от значения средней массы число частиц монотонно уменьшается до единицы. Частицы, форму которых принимали сферической[1], случайным образом были размещены в кубе, состоящем из $n \times n \times n$ ячеек $(n = 40)$; центры частиц были расположены в центре каждой ячейки куба. Пространство между частицами представляет матричную фазу с ненулевой растворимостью условных атомов второй фазы. Наряду с простой кубической упаковкой частиц, которая не является самой плотной (число частиц в ближайшем окружении равно шести), была рассмотрена гексагональная плотная упаковка частиц, когда число частиц в ближайшем окружении равно 12. Чтобы не рассматривать особенности массопереноса на границах, систему «замкнули» таким образом, что противоположные грани куба при кубической упаковке частиц и параллелепипеда при гексагональной упаковке являются продолжением друг друга.

При малых значениях объемной доли частиц второй фазы мы описывали диффузионное взаимодействие между частицами посредством самосогласованного диффузионного поля [1]. Изменение размеров частиц определено следующим образом:

$$\frac{dR_i}{dt} = \left(1 - \frac{\overline{R}}{R_i}\right) \cdot \frac{\overline{R}}{R_i}, \qquad (1)$$

где R_i и $\overline{R}$ — радиус i-й частицы и средний радиус соответственно. Таким образом, частицы с размером $R_i < \overline{R}$ будут растворяться, отдавая условные атомы в усредненное поле, а частицы с размером $R_i > \overline{R}$ будут расти, забирая условные атомы из поля.

При больших значениях объемной доли частиц второй фазы приближение усредненного поля теряет смысл, поскольку частицы располагаются вблизи друг друга. В таком случае мы рассматриваем взаимодействие частиц только со своим ближайшим окружением (т. е. частицы взаимодействуют непосредственно, а не че-

[1] Говоря в дальнейшем о массе частиц или их радиусе, мы учитываем, что существует однозначная взаимосвязь между этими величинами.

рез усредненное поле). Направленность массопереноса сохраняется согласно уравнению (1). Частицы с размером меньше среднего растворяются, отдавая условные атомы частицам из ближайшего окружения, с которыми перекрываются их локальные диффузионные поля, независимо от их размера. Аналогично, частицы с размером больше среднего растут, забирая атомы у частиц из ближайшего окружения независимо от их размера. Чтобы определить, какие частицы обмениваются условными атомами непосредственно, использован метод, предложенный в [11].

3. Результаты моделирования

Моделирование оствальдовского созревания было выполнено для кубической и гексагональной упаковок частиц при объемной доле второй фазы $Q \to 0$ и $Q \to \max$. При кубической упаковке максимальное значение объемной доли Q = 0,5, при гексагональной упаковке Q = 0,9. В начальный момент времени случайным образом выбрали 1000 частиц, поведение которых отслеживали в процессе моделирования. За единицу времени (один цикл) принималось количество выборок частиц, равное числу частиц в системе.

На рис. 1 приведено изменение массы частиц в течение цикла при кубической упаковке и объемной доле $Q \to 0$. Из рисунка видно, что при взаимодействии частиц посредством усредненного поля частицы с массой меньше средней растворяются, а частицы с массой больше средней растут. На начальных этапах моделирова-

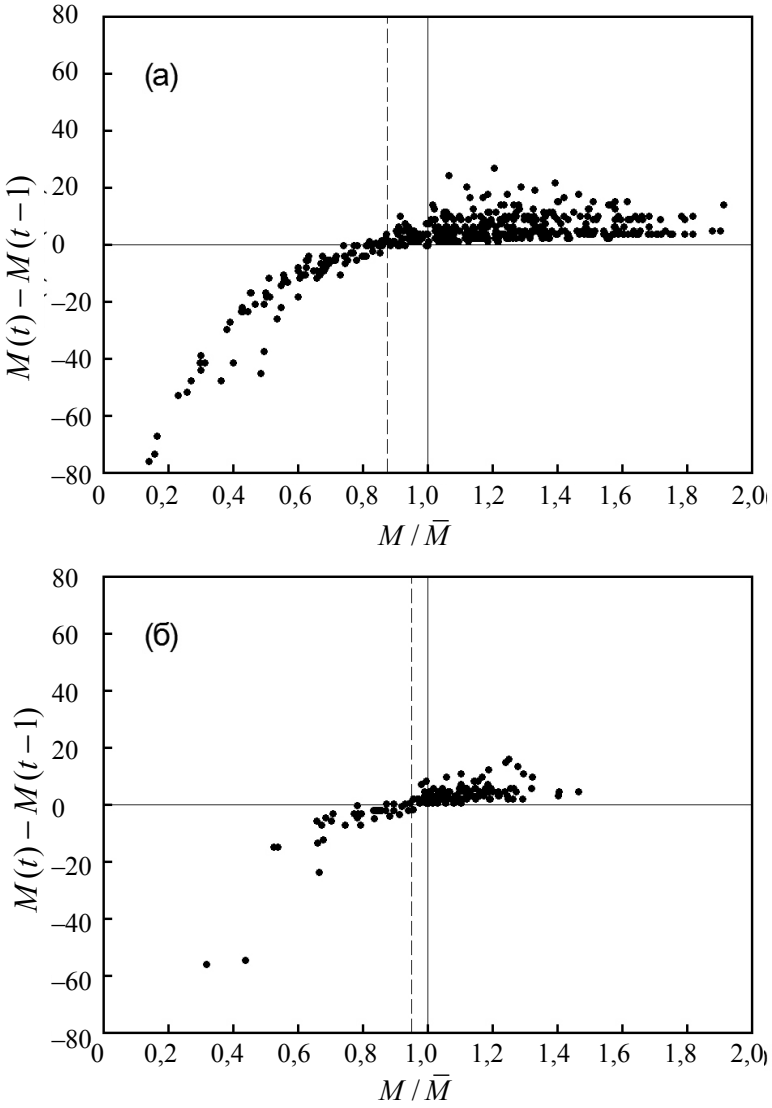


Рис. 1. Изменение массы частиц при кубической упаковке и объемной доле $Q \to 0$: а) на начальных этапах моделирования (10 циклов); б) на поздних этапах моделирования (200 циклов). Пунктирной линией отображена средняя масса частиц в начале цикла. По оси абсцисс отложено изменение массы выбранных частиц в течение одного цикла, по оси ординат — приведенная масса частиц

ния (10 циклов) средний размер частиц увеличивается быстрее, чем на поздних этапах моделирования (200 циклов); средний радиус изменяется со временем по закону $\overline{R}^3 \sim t$. Вместе с тем, на поздних этапах моделирования отсутствуют частицы с радиусом больше $1{,}5 \cdot \overline{R}$.

На рис. 2 отражено изменение массы частиц в течение цикла при кубической упаковке частиц и объемной доле $Q \to \max$. Из рисунка ясно, что на начальных этапах моделирования отсутствует определенная зависимость изменения массы частиц в течение цикла. Непосредственное взаимодействие частиц приводит к тому, что частицы с массой больше средней могут уменьшаться, а частицы с массой меньше средней — расти. С течением времени число частиц в системе уменьшается и зависимость изменения массы частиц приобретает вид, характерный для случая, когда частицы взаимодействуют посредством усредненного поля. Вместе с тем, встречаются частицы с массой меньше средней, которые растут, и частицы с массой больше средней, которые уменьшаются. Кубическая зависимость среднего радиуса частиц от времени сохраняется: $\overline{R}^3 \sim K \cdot t$. При этом константа скорости роста K увеличивается в 2,69 раза относительно константы скорости при объемной доле $Q \to 0$ (рис. 1, *б*).

Аналогичные результаты получены при гексагональной упаковке частиц. На рис. 3 представлено изменение массы частиц после 200 циклов при объемной доле $Q \to 0$ и $Q \to \max$. При $Q \to 0$ частицы с массой меньше средней растворяются, частицы с массой больше средней

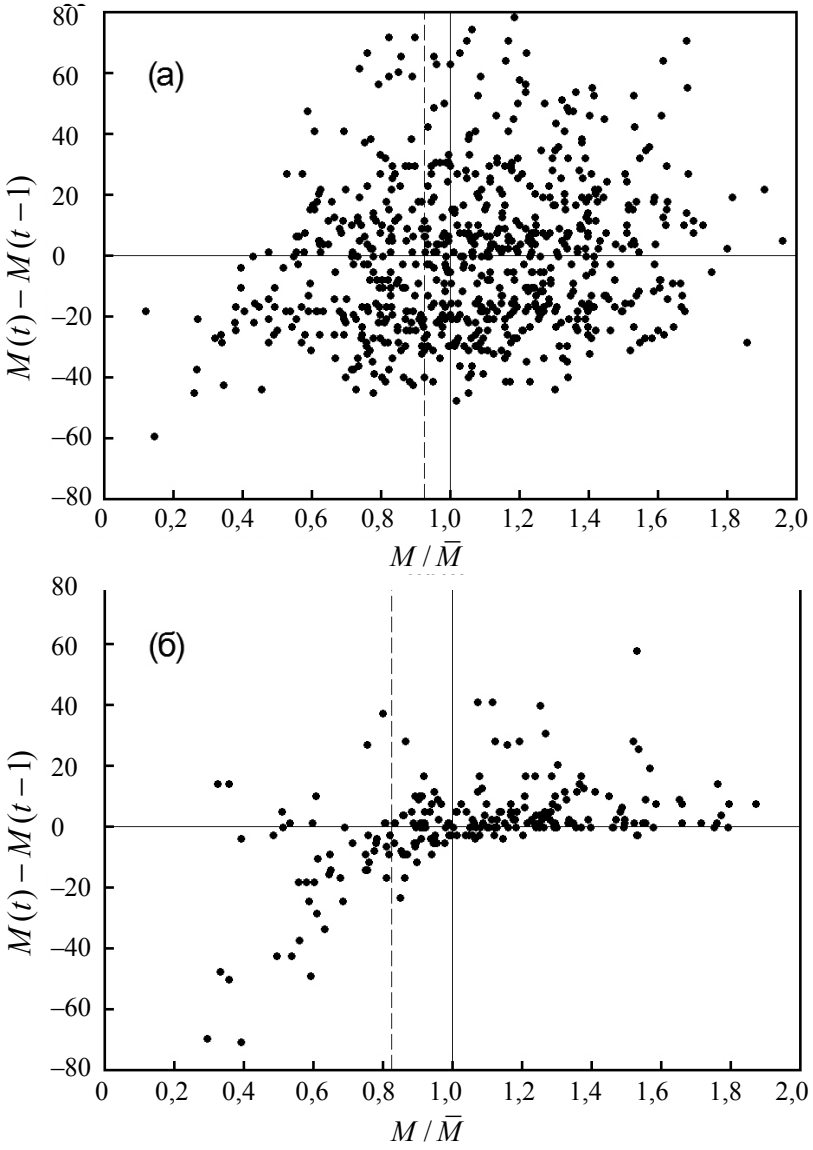


Рис. 2. Изменение массы частиц при кубической упаковке и объемной доле $Q \to \max$: а) на начальных этапах моделирования; б) на поздних этапах моделирования

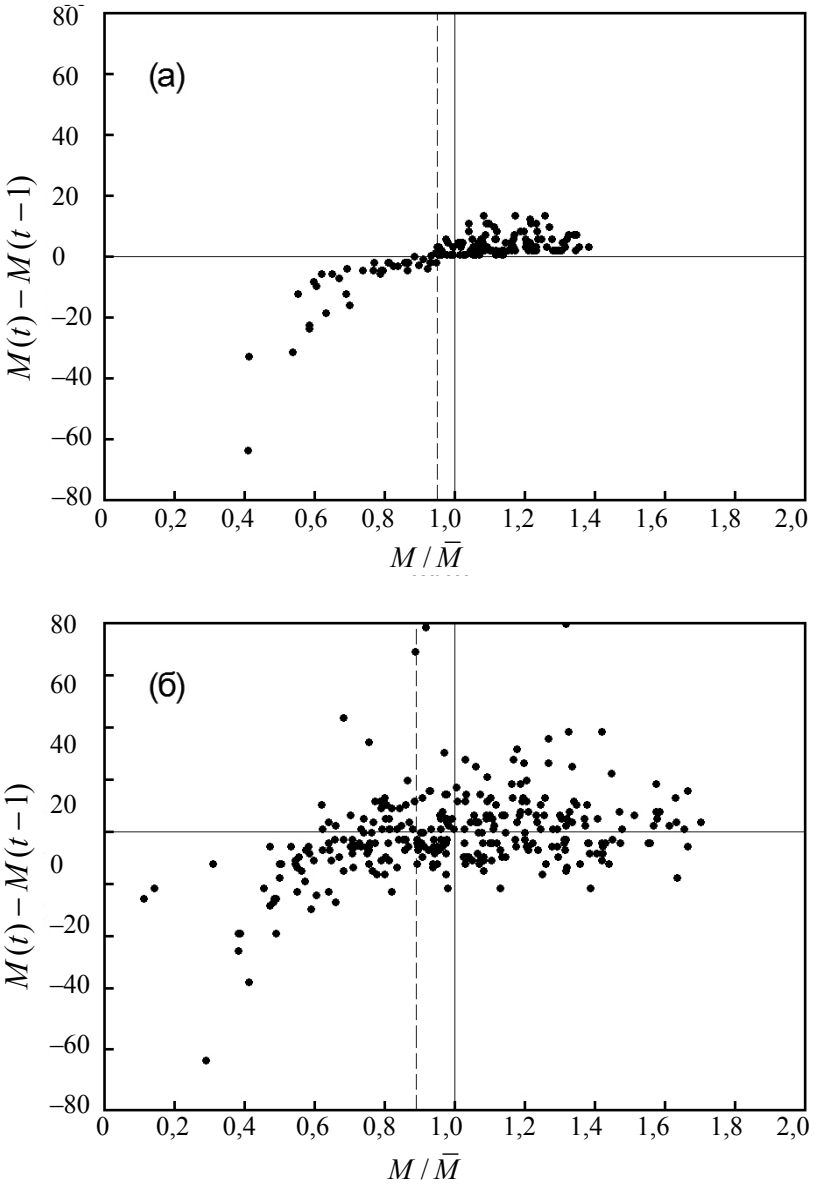


Рис. 3. Изменение массы частиц при гексагональной упаковке на поздних этапах моделирования (200 циклов) при объемной доле второй фазы:
а) $Q \to 0$ *; б)* $Q \to \max$

растут (рис. 3, *а*). Выполняется кубический закон роста среднего радиуса частиц, отсутствуют частицы с размером больше $1{,}5 \cdot \bar{R}$. При объемной доле $Q \to \max$ зависимость в изменении массы частиц (рис. 3, *б*) приобретает вид, характерный при объемной доле $Q \to 0$. Вместе с тем, встречаются частицы с массой меньше средней, которые растут, и частицы с массой больше средней, которые уменьшаются. Кубический закон роста среднего радиуса сохраняется, при этом константа скорости роста K больше в 2,15 раза по сравнению со значением при $Q \to 0$.

4. Заключение

Таким образом, при направленном массопереносе скорость роста частиц при больших временах не зависит от величины объемной доли частиц второй (конденсированной) фазы. Кубическая зависимость изменения среднего радиуса частиц от времени сохраняется. Вместе с тем, при непосредственном взаимодействии частиц, в отличие от взаимодействия посредством самосогласованного диффузионного поля, возможно отклонение от направленности массопереноса (частицы с массой меньше средней могут увеличиваться, а частицы с массой больше средней — уменьшаться). Это приводит к увеличению константы скорости роста среднего

радиуса частиц и более широкому распределению частиц по размерам по сравнению с результатами, предсказанными теорией ЛСВ.

Список литературы

1. Лифшиц И. М., Слезов В. В. О кинетике диффузионного распада твердых растворов // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1958. Т. 35. С. 479–492.

2. Wagner, C. Z. Theorie der Älterrung von Niederschlagen durch Umlösen / C. Z. Wagner // Elektrochem. 1961. Bd. 65. S. 581–591.

3. Слезов В. В., Сагалович В. В. Диффузионный распад твердых растворов: экспериментальный обзор. М. : ЦНИИатоминформ, 1984. 81 с.

4. Baldan, A. J. Progress in Ostwald ripening theories and their applications to the γ′-precipitates in nickel-base superalloys. Part II: Nickel-base superalloys / A. J. Baldan // Mater. Sci. 2002. Vol. 37. P. 2379–2405.

5. Сергеенкова В. М., Березуцкий В. В. О скорости роста дисперсных частиц в никеле // Порошковая металлургия. 1967. № 7. С. 84–88.

6. Белая Е. А., Викторов В. В. Массоперенос при взаимодействии мелкодисперсных оксидов $TiO_2 – Cr_2O_3$ // Вестн. Юж.-Урал. гос. ун-та. 2007. № 19. С. 86–90.

7. Yongsam, K. Coarsening Kinetics of a Spinodally Decomposed Vicinal Si (111) Surface / K. Yongsam [et al.] // PhysRevLett. 2009. Vol. 102.

8. Baldan, A. J. Progress in Ostwald ripening theories and their applications to nickel-base superalloys. Part I: Ostwald ripening theories / A. J. Baldan // Mater. Sci. 2002. Vol. 37. P. 2171–2202.

9. Wang, K. G. Modeling and simulation for phase coarsening: A comparison with experiment / K. G. Wang, M. E. Glicksman, K. Rajan // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 69.

10. Wang, K. G. Ostwald Ripening in Materials Processing // K. G. Wang, M. E. Glicksman // Material Processing Handbook / ed. by J. Groza [et al.]. 2007. 840 p.

11. Ardell, A. J. The effect of volume fraction on particle coarsening: Theoretical considerations / A. J. Ardell // Acta Metall. 1972. Vol. 20. P. 61–71.