Fundamentals of Materials Science Homework 22

Name: Xiao，Liyang Date: 05/23/2017 Student #: 15090215

Homework Problems:

1. **Suppose that liquid nickel is undercooled until homogeneous nucleation occurs. Calculate**
   (a) the critical radius of the nucleus required; and
   (b) the number of nickel atoms in the nucleus.
   Assume that the lattice parameter of the solid FCC nickel is 0.356 nm.

Solution:

(a) $\because \gamma = -0.255 J/m^2; T_m = 1728K; \Delta H_f = -2.53\times10^9 J/m^3; \Delta T = 592K$

$$r^* = \left(-\frac{2\gamma T_m}{\Delta H_f}\right)\left(\frac{1}{T_m - T}\right) = \left(-\frac{2\times 0.255\mathrm{J}/m^2\times 1728K}{-2.53\times10^9 J/m^3}\right)\left(\frac{1}{592K}\right) = 0.588\mathrm{nm}$$

(b) $\mathrm{V_c} = \mathrm{a}^3 = (0.36\mathrm{nm})^3 = 0.047\mathrm{nm}^3$

$$\mathrm{V} = \frac{4}{3}\pi\cdot\mathrm{r}^3 = \frac{4}{3}\times\pi\times(0.588\mathrm{nm})^3 = 0.851\mathrm{nm}^3$$

$$\mathrm{n} = \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{V_C}} = \frac{0.851\mathrm{nm}^3}{0.047\mathrm{nm}^3} = 18$$

$$\mathrm{N} = 4n = 4\times18 = 72$$

$\therefore$ the number of nickel atoms in the nucleus are about 72.

2. **换个中文写法，上题中假设金属镍以均匀形核的方式凝固，稳定晶核的数目为每立方米 10^6 个。试分别计算过冷度为 200 K 和 300 K 时的临界晶核半径及稳定晶核的数目。你计算的结果能说明什么问题？**

Solution:

当过冷度为 200 K，T2=1528K；当过冷度为 300 K，T3=1428K
当金属镍以均匀形核的方式凝固时，T1=1136k，由题目可知，此时形核率为 10^6 个每立方米

$$\mathrm{r}^*_{200\mathrm{K}} = \left(-\frac{2\gamma T_m}{\Delta H_f}\right)\left(\frac{1}{T_m - T}\right) = \left(-\frac{2\times 0.255 J/\mathrm{m}^2\times 1728k}{-2.53\times10^9 J/m^3}\right)\left(\frac{1}{200k}\right) = 1.74\mathrm{nm}$$

$$\Delta G^*_{200k} = \left(\frac{16\pi \times 0.255^3 \times 1728^2}{3 \times \left(-2.53 \times 10^9\right)^2} \right) \times \frac{1}{200^2} = 3.24 \times 10^{-18} J$$

$$n^*_{200k} = 3.41 \times 10^{36} \times \exp\left(-\frac{3.24 \times 10^{-18}}{1.38 \times 10^{-23} \times (1728 - 200)} \right) = 6.34 \times 10^{-31}$$

$$\mathrm{r}^*_{300\mathrm{K}} = \left(-\frac{2\gamma T_m}{\Delta H_f} \right)\left(\frac{1}{T_m - T} \right) = \left(-\frac{2 \times 0.255 J/\mathrm{m}^2 \times 1728k}{-2.53 \times 10^9 J/m^3} \right)\left(\frac{1}{300k} \right) = 1.16nm$$

$$\Delta G^*_{300k} = \left(\frac{16\pi \times 0.255^3 \times 1728^2}{3 \times \left(-2.53 \times 10^9\right)^2} \right) \times \frac{1}{300^2} = 1.44 \times 10^{-18} J$$

$$n^*_{300k} = 3.41 \times 10^{36} \times \exp\left(-\frac{1.44 \times 10^{-18}}{1.38 \times 10^{-23} \times (1728 - 300)} \right) = 6.28 \times 10^4$$

计算结果说明：过冷度越大，越有利于形核，形成的晶核数目越多。

3. **再换个出法：Suppose that solid nickel was able to nucleate homogeneously with an undercooling of only 22°C.**
   How many atoms would have to group together spontaneously for this to occur? Assume that the lattice parameter of the solid FCC nickel is 0.356 nm.

Solution:

∵△T=22℃

$$\mathrm{r}^* = \left(-\frac{2\gamma T_m}{\Delta H_f} \right)\left(\frac{1}{T_m - T} \right) = \left(-\frac{2 \times 0.255 J/\mathrm{m}^2 \times 1728k}{-2.53 \times 10^9 J/m^3} \right)\left(\frac{1}{22k} \right) = 1.45nm$$

$$\mathrm{V} = \frac{4}{3}\pi \cdot \mathrm{r}^3 = \frac{4}{3} \times \pi \times (1.45\mathrm{nm})^3 = 12.76\mathrm{nm}^3$$

$$\mathrm{n} = \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{V_C}} = \frac{12.76\mathrm{nm}^3}{4.5 \times 10^{-5}\mathrm{nm}^3} = 2.8 \times 10^5$$

$$\mathrm{N} = 4n = 4 \times 2.8 \times 10^5 = 1.12 \times 10^6$$

4. **试证明，均匀形核时，形成临界晶核的ΔG^*与其体积之间的关系式为$\Delta G^* = \frac{V}{2}\Delta G_V$。小测验题！**

Solution:

$$\because \mathrm{r}^* = -\frac{2\gamma}{\Delta G_v} \rightarrow \gamma = -\frac{\Delta \mathrm{G}_V \cdot r^*}{2},$$

$$\therefore \Delta G^* = -\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot \mathrm{r}^{*3}\, \Delta \mathrm{G}_\mathrm{V} = -\frac{V}{2} \Delta G_V 。$$

5. **试比较均匀形核与非均匀形核的异同点。**

Solution:

相同点：1.临界晶核半径相等

2.形核率变化的趋势一样，即随着过冷度的增大，先增加。当达到一定过冷度以后，开始降低。

3.结构起伏和能量起伏是形核的基础

不同点：均匀形核所需要的过冷度很高，而非均匀形核所需要的过冷度比较低。

6. **请阐述晶粒细化的方法。上课讲了三种，请稍微详细论述一下每种是怎么回事儿。**

Solution:

1.增大过冷度。

当过冷度增大时，成核率 N 升高，会产生更多的晶核。与此同时，由扩散控制的长大速率 G 将会降低，使得形成的晶核无法长大，从而达到了晶粒细化的效果。

2.机械振动或搅拌

通过物理方法将大的晶粒打碎形成小的晶粒

3.孕育处理

向液态金属中加入某些杂质，进行非自发形核过程，以达到晶粒细化的目的。

7. **为什么金属结晶时一定要有过冷度？影响过冷度的因素是什么？固态金属熔化时是否会出现过热？为什么？**

Solution:

晶体结晶的条件是（GS-GL）<0,要想达到这个条件，要求 T<Tm，所以会出现实际凝固点的温度比理论凝固点的温度要低一些，他们的差值就表现为一定的过冷度。

冷却速度影响了过冷度，冷却速度越大，过冷度也越大。

不会出现过热因为熔化本来就是要让金属达到（超过）其固相线温度。