

Рост дендритов

Групповой проект. Этап 1.

Дворкина Е.В., Чемоданова А.А., Серёгина И.А., Волгин И.А., Александрова У.В., Голощапов Я.В.

26 марта 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Дворкина Е. В.
- Чемоданова А. А.
- Серёгина И. А.
- Волгин И. А.
- Александрова У. В.
- Голощапов Я. В.

- Александрова Ульяна Вадимовна
- студент учебной группы НФИбд-01-22
- Российский университет дружбы народов
- <https://github.com/AleksandrovaUV>



Вводная часть

- Ключевая роль в металлургии и литейном производстве.
- теоретическое понимание процессов кристаллизации,
- улучшение технологий производства материалов.



Рис. 1: Дендритная кристаллизация



- Дендриты
- Кристаллические дендриты

Рис. 2: Двумерные дендритные структуры на основе меди

Цели:

- Исследовать модель роста дендритов

Задачи:

- Рассмотреть комбинированную модель роста дендритов.
- Рассмотреть алгоритм построения модели роста дендритов.
- Построить модель роста дендритов.
- Исследовать зависимость от времени числа частиц в агрегате и его среднеквадратичного радиуса в разных режимах.

Теоретические сведения о модели

- плотность ρ ,
- удельная теплота плавления на единицу массы L ,
- теплоемкость при постоянном давлении c_p (также на единицу массы),
- коэффициент теплопроводности κ (для простоты будем считать теплопроводность и плотность не зависящими от температуры и одинаковыми для твердой и жидкой фаз – так называемая симметричная модель),
- температура плавления T_m .

Безразмерное переохлаждение:

$$S = c_p \frac{(T_m - T_\infty)}{L} \quad (1)$$

При $S \geq 1$ — полное затвердевание, при $S < 1$ — частичное.

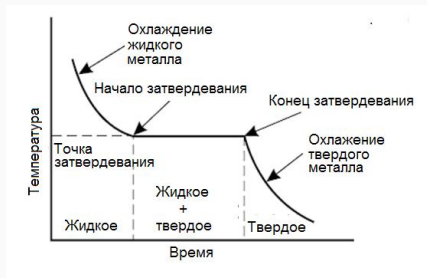


Рис. 3: Взаимосвязь кривизны поверхности и температуры плавления

Для описания изменения температуры со временем в двумерном случае используется уравнение теплопроводности:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \equiv \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

Скорость роста границы кристаллизации

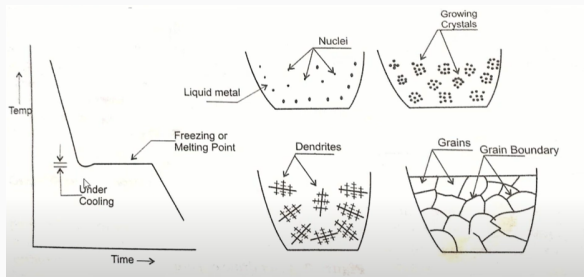


Рис. 4: Стадии затвердевания кристаллических материалов

Скорость движения границы V связана с градиентом температуры.

Условие Стефана:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{V} = \frac{\kappa}{\rho L} (\mathbf{n} \cdot \nabla T|_s - \mathbf{n} \cdot \nabla T|_l) \quad (3)$$

Градиенты температуры в твердой и жидкой фазах определяют поток тепла.

Условие Гибса-Томсона:

Температура границы снижается для компенсации поверхностного натяжения:

$$T_b = T_m \left(1 - \frac{\gamma T_m}{\rho L^2 R} \right). \quad (4)$$

Кинетическое замедление роста:

$$\Delta T_b = -T_m / \beta V. \quad (5)$$

Здесь β — кинетический коэффициент.

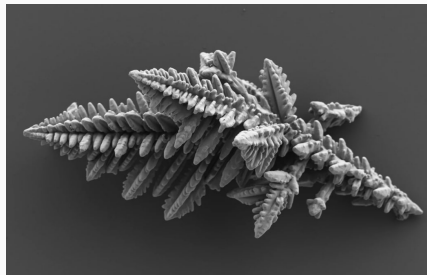


Рис. 5: Демонстрация роста выступов дендрита

Вводится безразмерная температура $\tilde{T} = c_p(T - T_\infty)/L$, где T_∞ — начальная температура расплава. Уравнение теплопроводности для \tilde{T} имеет вид

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \chi \nabla^2 \tilde{T}, \quad (6)$$

где $\chi = \kappa/\rho c_p$ — коэффициент температуропроводности.

Точное выражение для $\nabla^2 T$ в узле (i, j)

$$\nabla^2 T \approx \frac{\langle T_{(i,j)} \rangle - T_{i,j}}{(4 + 4w)(1 + 2w)h^2}, \quad (7)$$

где $\langle T_{(i,j)} \rangle$ — среднее значение температуры в соседних узлах, w — коэффициент, учитывающий влияние диагональных соседей (обычно $w = 1/2$).

$$\hat{T}_{i,j} = T_{i,j} + \frac{\chi \Delta t \nabla^2 T}{m}. \quad (8)$$

m - количество подшагов

Условие перехода в твердую фазу

Узел переходит из жидкого в твердое состояние, если:

$$T \leq \tilde{T}_m(1 + \eta_{i,j}\delta) + \lambda s_{i,j}, \quad (9)$$

где:

- \tilde{T}_m — безразмерное начальное переохлаждение,
- $\eta_{i,j}$ — случайное число в интервале $[-1, 1]$,
- δ — величина случайного отклонения температуры (теплового шума),
- λ — величина, связанная с капиллярным радиусом,
- $s_{i,j}$ — параметр, учитывающий кривизну границы.

Во время выполнения первого этапа группового проекта мы:

- сделали теоретическое описание модели роста дендритов
- определили задачи дальнейшего исследования