



The possibility of determination of dendritic crystals configuration is shown, what in combination with complex of equations of unsteady-state heat conduction and convective diffusion makes universal physical-mathematical basis, allowing to forecast the development of time and area of complex processes.

Ю. А. САМОЙЛОВИЧ, НПП «Платан»,
В. И. ТИМОШПОЛЬСКИЙ, БНТУ

УДК 621.746

РАСЧЕТЫ РОСТА СКЕЛЕТНЫХ ДЕНДРИТОВ ПРИ ЗАТВЕРДЕВАНИИ СПЛАВОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕОРИИ ФРАКТАЛОВ

Первичная литая структура стальной заготовки в значительной мере определяет качество металла при последующей обработке давлением. Исследование макроструктуры литой стали, полученной методом непрерывного литья, позволяет выявить три основные зоны в поперечном сечении литой заготовки: поверхностную зону мелкодисперсных кристалликов, четко выраженную зону столбчатых кристаллитов и расположенную в центре заготовки зону глобулярных (равноосных) кристаллов.

Широкое распространение дендритных форм роста кристаллов при затвердевании металлов и сплавов вызвало многочисленные попытки теоретического объяснения причин дендритного роста, обзор которых приведен в работах [1–3]. Согласно Р.Фогелю [4], дендритный рост кристаллов стимулируется тепловыми явлениями затвердевающего вещества: высокой величиной скрытой теплоты плавления, легкостью самопроизвольного образования зародышей кристаллов, анизотропией формы кристалла [1, с. 350]. В статье А. Папапетроу [5], опубликованной в 1935 г., основной причиной дендритного роста считается неоднородное отложение вещества на ребрах и гранях кристалла и впервые выводится линейное уравнение, связывающее плотность потока вещества с текущей концентрацией растворенного вещества:

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = k(C - C_0),$$

где C – концентрация вещества вблизи от границы раздела фаз.

В 1936 г. В.Д. Кузнецов впервые предложил формулу, связывающую скорость роста столбчатых кристаллов в стальном слитке с градиентом температуры на границе раздела фаз:

$$V_{кр} = \frac{k}{\rho L_{кр}} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1)$$

где k , ρ , $L_{кр}$ – соответственно коэффициент теплопроводности, массовая плотность и скрытая теплота плавления затвердевающего металла.

Наиболее обстоятельный обзор исследований, посвященных дендритному росту кристаллов, представлен в монографии Д.Д. Саратовкина [3], причем обсуждение дендритного роста носит качественный характер: теоретическая часть ограничена выводом формулы (1). Лишь во второй половине прошлого столетия рассмотрение причин дендритного роста в металлах и сплавах связывается с достаточно строгим теоретическим анализом тепловых и диффузионных явлений при затвердевании материалов, представленным в работах Г.П. Иванцова, Б.Я. Любова, В.Т. Борисова, В.А. Тиллера, Б. Чалмерса и др. [6–17].

В настоящее время интенсивное развитие численных методов решения уравнений математической физики с использованием компьютерных технологий расширило возможности теоретических исследований, однако проблема дендритного роста оказалась чрезвычайно сложной и не сводится к решению чисто вычислительных проблем. Представляется необходимым внимательно рассмотреть физические аспекты усложнения геометрической формы растущих кристаллов в конкретных условиях формирования отливок и слитков сложного химического состава.

В работе Д.А.Петрова, А.А.Бухановой [18] исследовано возникновение дендритных кристаллов в сплаве алюминия с оловом, с которым алюминий образует эвтектическую смесь и не дает твердых растворов. Металлы (алюминий чистотой 99,7% и олово чистотой 99,5%) плавляли в тигельной печи, причем сначала расплавляли олово, а затем постепенно, малыми порциями добавляли алюминий. После некоторого перегрева и тщательного перемешивания расплав медленно охлаждали до температуры ниже эвтектической (232 °С) при средней скорости охлаждения 10–15 град/ч. Из сли-

точков, застывших в тигле, вырезали образцы для изготовления шлифов, на которых изучали форму и размеры образующихся дендритных кристаллов сплава.

Главная особенность полученных в этой работе дендритных кристаллов состояла в том, что при содержании алюминия в сплаве в пределах 3–5% дендритные кристаллы имели форму октаэдров с пустотелыми гранями (рис. 1, а, б).

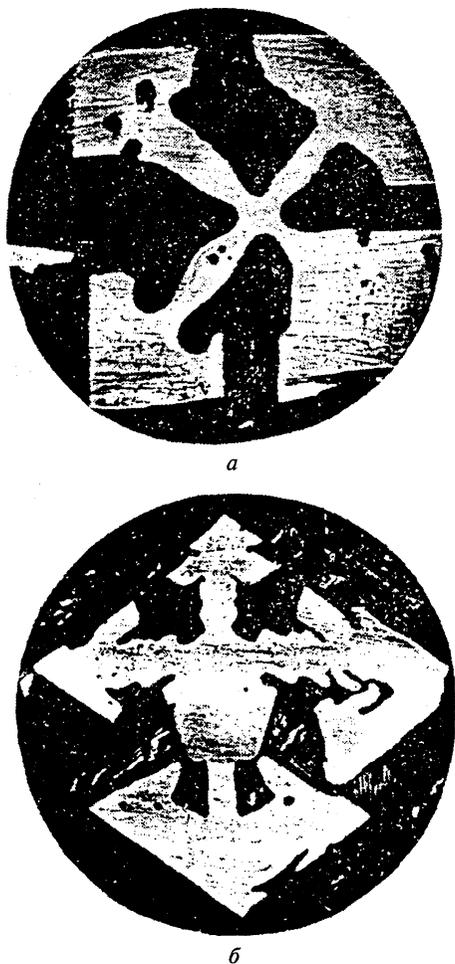


Рис. 1. Форма дендритных кристаллов сплава олова с 3% алюминия, характеризуемая возникновением октаэдров с пустотелыми гранями, по данным [18]

Авторы работы [18] предположили, что возникновение кристаллов с пустотелыми гранями связано с различием поверхностной энергии атомов, расположенных на разных участках поверхности. Исходный микрокристаллик призматической формы развивается, по их мнению, при ускоренном росте ребер. Это вызвано тем, что атомы, расположенные на ребрах кристалла, обладают большей поверхностной энергией, чем атомы, расположенные на гранях. Такое различие в поверхностной энергии приводит к ускоренному росту ребер по схеме, показанной на рис. 2, и в конечном счете, к возникновению кристалла «скелетной» формы.

Вместе с тем, существует и другая точка зрения по вопросу возникновения скелетных форм

металлических дендритов, связывающая образование пустотелых граней в дендритном кристалле с влиянием примесей, имеющихся в маточной среде – расплаве. К примеру, в обзорной статье А.А. Чернова [19] отмечается влияние внешних условий на форму кристаллов цинка, выращенных из расплава. В частности, отмечается, что «формы роста оставались многогранными при любых размерах (порядка сантиметра), если рост шел в вакуумированном сосуде, и становились скелетными, если в кристаллизационную камеру напускался аргон» [19, с. 182].

Широкое распространение дендритных форм роста металлических кристаллов потребовало обобщения устоявшихся представлений классической кристаллографии, основные закономерности которой относятся к кристаллам с четко выраженными «гранными» формами. Возникла необходимость обобщенной классификации кристаллов, определенная группа которых обладает склонностью к образованию дендритных (в частности, и скелетных) конфигураций. Инициатива такого обобщения кристаллографии принадлежит И.И. Шафрановскому [20].

Во введении к книге [20] автор отмечает, что интерес к изучению скелетных форм кристаллов имеет многолетнюю историю. Многие исследователи пытались разгадать природу формирования кристалликов воды (снежинок) в виде шестиугольных узоров, обладающих четкой гексагональной симметрией. По-видимому, И. Кеплеру (1571–1630) принадлежит первая гениальная попытка объяснить возникновение шестиугольных форм на снежинках их внутренним сложением из мельчайших шаровых частиц. Именно по этому пути пошли впоследствии Р. Гук, Х. Гюйгенс и М.В. Ломоносов, связывая внешнюю геометрию кристаллических форм с внутренней геометрией плотнейших и разреженных упадок мельчайших частиц («корпускул»). Первые попытки формализации описания снежинок принадлежат И.И. Шафрановскому [20, 21], который дополнил опорные понятия кристаллографии о «гранных» формах понятиями «вершинных» и «реберных» форм.

Введение понятий «вершинных» и «реберных» простых форм послужило первым шагом формализации дендритных кристаллов путем включе-

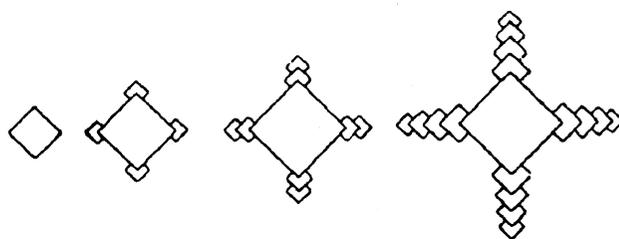


Рис. 2. Схема последовательного развития кристалла при преимущественном росте его вершин (согласно [18])

ния некоторых природных нетипичных форм в классические объекты кристаллографии. Следующим закономерным шагом «легализации» дендритных кристаллов должен стать способ математического описания внешней формы дендритов, позволяющий учесть разнообразные отклонения от теоретических, строго симметричных форм, вызванные воздействием внешней (маточной) среды, в которой растут кристаллы.

В последнее время достаточно широкое применение получило использование теории фракталов для построения внешнего контура дендритных (скелетных) кристаллов на базе теоретической физики и материаловедения [22–24].

Следует отметить, что практически на протяжении последних трех столетий развитие математической физики базировалось на использовании дифференциального исчисления, что предполагает возможность определения производных от исследуемой функции по некоторым независимым

переменным ($\frac{\partial y}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 \Omega}{\partial u^2}$ и т.д.). Вместе с тем, для

многих природных объектов определение производных функций, требующее «гладкости» линий и поверхностей, вдоль которых изучается изменение искомой функции, представляется затруднительным, а иногда и в принципе невозможным.

В связи с этим в традиционной математической физике возникла необходимость введения новых понятий, на основе которых станет возможным математическое описание разнообразных типичных объектов. Таким новым понятием является «фрактал», введенный в науку в 1983 г. Бенуа Мандельбротом [25]. Фрактал (от лат. Fractus – изломанный) – это структура, обладающая двумя важнейшими признаками: изломанностью и самоподобием.

Изломанность фрактала понятна и визуальна, и математически как отсутствие производной в каждой точке излома. Простейшее толкование «самоподобия» состоит в том, что часть объекта есть уменьшенная копия целого, или, в более общем смысле: «часть объекта есть деформированная, но «похожая» часть целого».

Самоподобные фрактальные функции, не имеющие производной ни в одной своей точке, были открыты в конце XIX в. (например, функция Вейерштрасса

$$W(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a^n \cos(b^n \pi x), \quad a < 1, b > 1, ab > 1,$$

но вместе с тем были решительно отвергнуты большинством математиков.

Понадобилось целое столетие для осознания необходимости математического описания множества объектов, не обладающих свойством дифференцируемости во всех точках внешнего контура.

В настоящее время разработке и изложению теории фракталов посвящены многие работы [26–28]. Математический аппарат теории фракталов

основан на использовании теории функций комплексного переменного и введении понятия производных функций дробного порядка. Наиболее полное изложение теории производных и интегралов дробного порядка приводится в [29], представляющей собой наглядный пример плодотворного сотрудничества белорусских и российских математиков. Введение понятия производных дробного порядка позволило расширить пределы дифференциального исчисления и его приложений ко многим объектам, не обладающим дифференцируемостью во всех точках внешнего контура.

В качестве примера практического использования обобщенного дифференциального исчисления можно указать работы, посвященные динамике деформируемых твердых тел [24, 30].

В последнее время появились попытки использования теории фракталов при моделировании процессов формирования первичной кристаллической структуры металлов [31].

Ниже приводятся примеры использования некоторых алгоритмов теории фракталов для описания конфигурации дендритных (скелетных) кристаллов, в соответствии с которыми авторами настоящей статьи разработана компьютерная программа. На практике построение фракталов осуществляется с применением численных методов и компьютерных технологий, в соответствии с которыми принято разделять фракталы на две группы: детерминированные и стохастические [32]. Алгоритм построения детерминированных фракталов основан на использовании так называемых *L*-систем. Впервые понятие *L*-системы было введено в 1968 г. А. Лидермайером при разработке языков программирования и позднее стали основой численного метода расчета детерминированных фракталов.

В основе метода лежит так называемая «тертл-графика» (от англ. «turtle» – черепашка). Основной компонентой метода является движущаяся точка (черепашка), которая перемещается по экрану монитора компьютера дискретными шагами и прочерчивает свой след в соответствии с заданными правилами. Мгновенное положение черепашки задается тремя параметрами (x , y , α), где x , y – координаты черепашки; α – направление следующего шага (угол, отсчитываемый от положительного направления оси x). Последовательность команд, определяющая направление перемещения и действия черепашки, задается кодовым словом.

В соответствии с изложенной методикой проведены две серии расчетов по построению контура дендритных (скелетных) кристаллов, результаты которых приведены в графической форме.

Первая серия расчетов относится к построению скелетных дендритов как совокупности их «реберных форм» (по классификации Шафрановского) для гексагональной и кубической сингоний, имеющих максимальное распространение среди промышленных металлов и сплавов.

На рис. 3, *a, б* представлена система дендритных осей кристалла гексагональной формы, являющихся основой построения дендритного кристалла, обладающего набором ветвей первого, второго и третьего порядка. Предполагается, что кристалл растет на плоской охлаждаемой поверхности, в связи с чем во внимание принимается лишь большая часть ветвей, относящихся к плоскости $Y > 0$. Если же рост кристалла не ограничен внешней поверхностью, т.е. растет в массе охлаждаемого расплава, то расчет формирует систему дендритных ветвей, показанную на рис. 3, *в*.

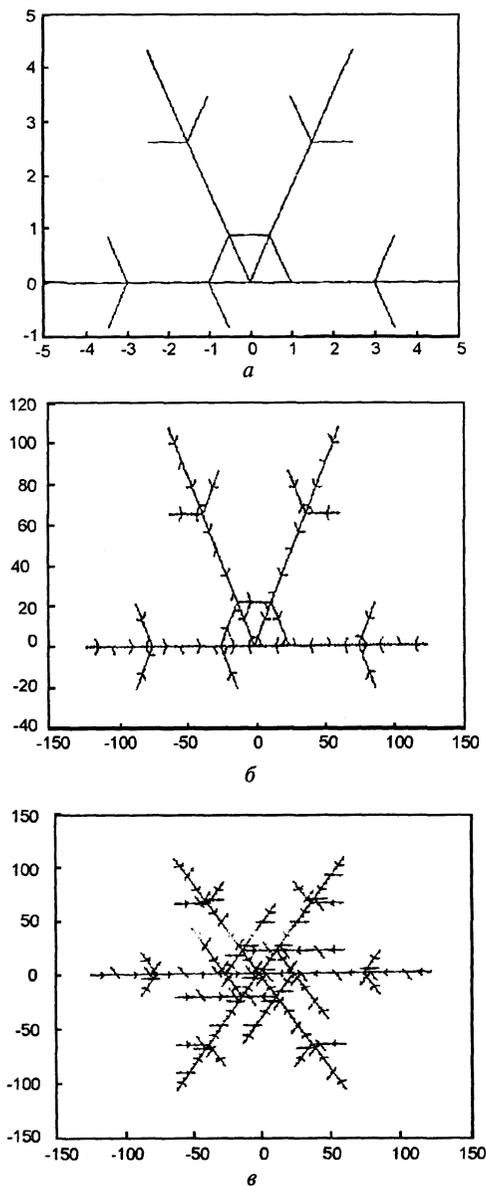


Рис. 3. Построение скелета гексагональной формы как основы формирования дендритного кристалла, обладающего набором ветвей первого, второго и третьего порядка: схемы *a* и *б* соответствуют зарождению кристалла вблизи поверхности отливки, что приводит к возникновению неполной кристаллической решетки; схема *в* отвечает свободному развитию кристалла с гексагональной симметрией

С целью большего соответствия графической модели дендрита гексагональной формы наблюдаемым природным шестиугольным снежинкам про-

грамма расчетов дополнена некоторыми деталями, в результате чего получается фрактальный рисунок (рис. 4). Сравнивая фотографии снежинок (рис. 4) с портретом снежинки, полученным на основе теории фракталов, можно констатировать их достаточно полное соответствие. Как отмечалось ранее, для железа и его сплавов кристаллическая решетка относится к гексагональной и кубической сингоний, для которой характерно расположение ветвей дендрита различного порядка под углом 90° по отношению друг к другу. Для этого случая построение дендрита скелетной формы приводит к «портретам», показанным на рис. 5, *a-в*.

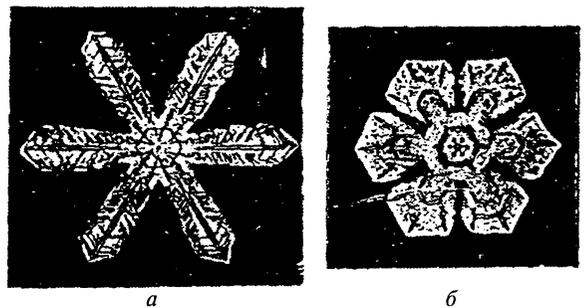


Рис. 4. Фотографии двух видов снежинок, обладающих гексагональной симметрией [32]

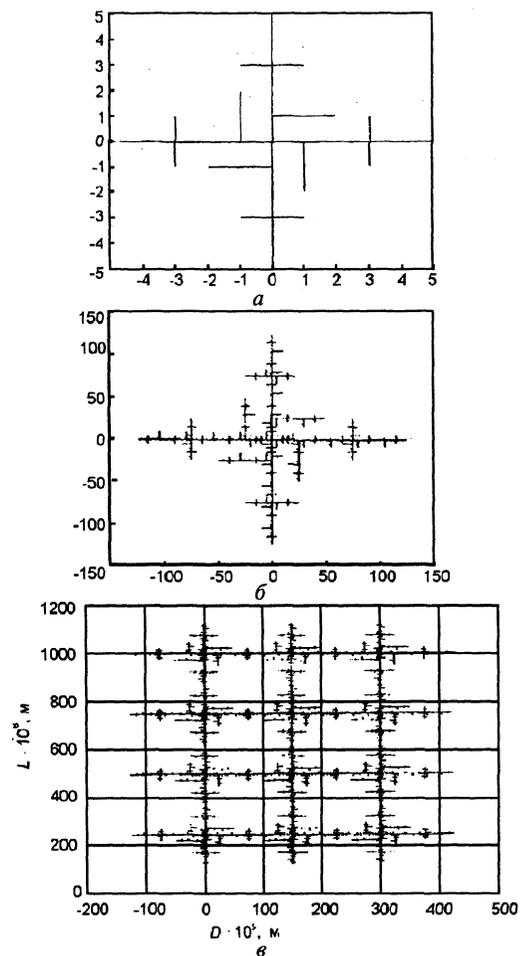


Рис. 5. Построение скелета кубической сингонии, характерной для большинства сплавов на основе железа: схемы *a* и *б* соответствуют случаю возникновения единичного скелетного дендрита; схема *в* иллюстрирует возможность построения скелета для пакета смежных кристаллов, растущих в одном направлении, т.е. системы столбчатых дендритов

Вторая серия расчетов содержит «портреты» дендритов, обладающие более сложной (и более адекватной реальности) формой. Так, на рис. 6 приведены контуры дендритного кристалла, растущего от плоской охлаждаемой поверхности. В расчетах использована программа, приведенная в [26, 27], дополненная параметрами, позволяющими имитировать пошаговый прирост высоты дендрита (вдоль оси Y). Следует отметить, что метод фракталов допускает построение структуры кристаллов, отличающихся высокой степенью сложности. В качестве примера на рис. 7, a – $в$ приведен ряд фрактальных портретов кустовидных структур, обладающих определенным сходством со снимками, получаемыми при металлографическом анализе сферолитных кристаллических образований.

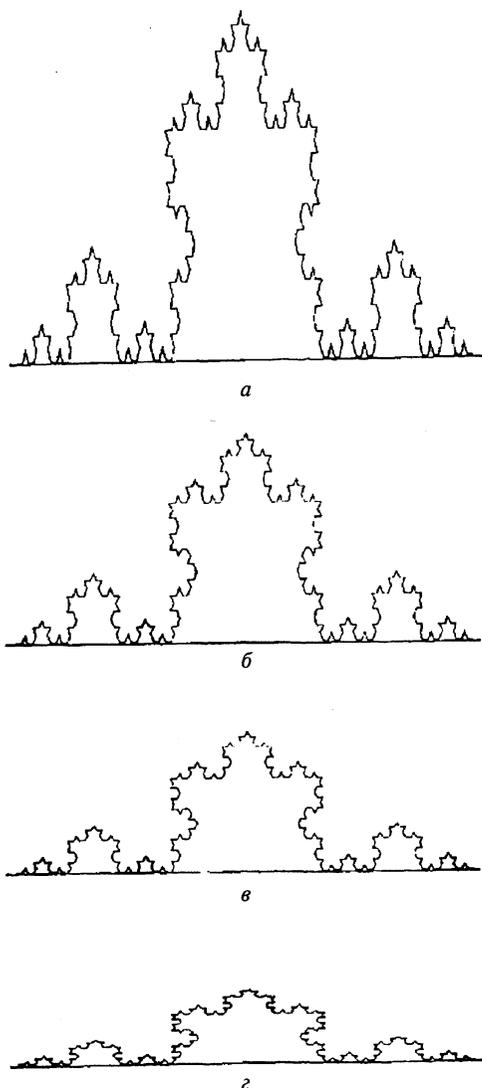


Рис. 6. Пример построения серии деформированных «Снежинок Кох» для нескольких последовательных моментов времени как пример моделирования роста дендритного кристалла на охлаждаемой поверхности

Таким образом, показана возможность определения конфигурации дендритных кристаллов, что в сочетании с комплексом уравнений нестационарной

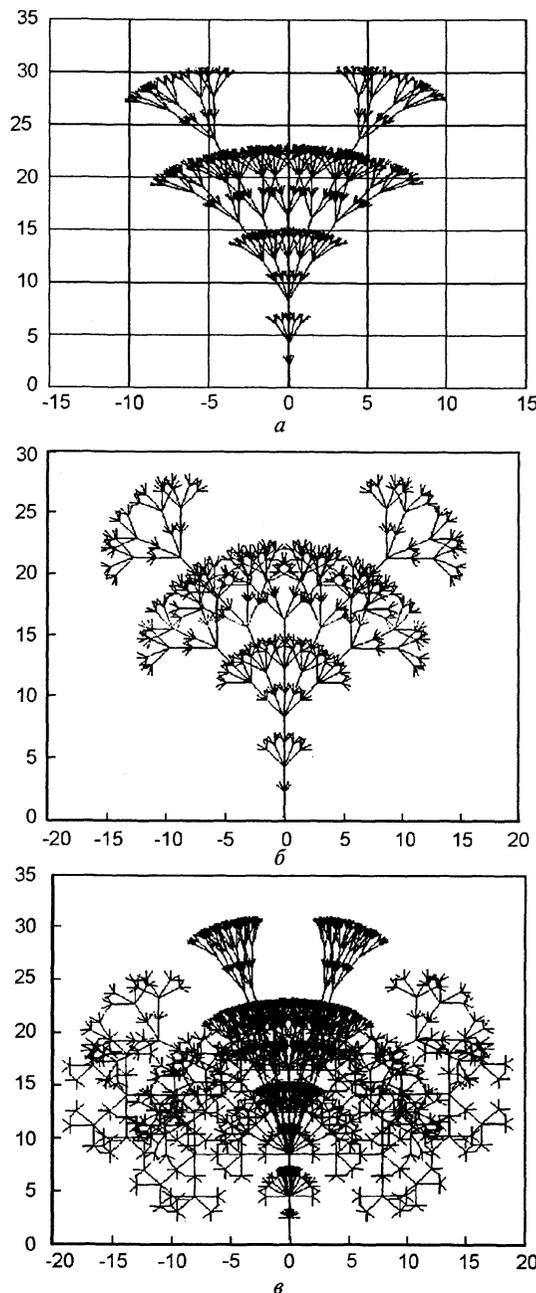


Рис. 7. Разновидности кустовидных дендритов («цветов»), построенных с использованием фрактальной L -процедуры на основе теплопроводности и конвективной диффузии создает универсальную физико-математическую базу, позволяющую на основе использования современных компьютерных технологий прогнозировать развитие во времени и пространстве сложных процессов формирования кристаллической структуры затвердевающих слитков, в том числе и при непрерывной разливке стали.

Литература

1. Бакли Г. Рост кристаллов. М.: ИЛ, 1954.
2. Кузнецов В.Д. Кристаллы и кристаллизация. М.: Гостехтеориздат, 1954.
3. Саратовкин Д.Д. Дендритная кристаллизация. М.: Metallurgizdat, 1957.
4. Vogel R. Zs. Anorg. Chem. 1921, Bd. 116. S.21.
5. Papapetrou A. Zs. fur Kristallographie. 1935. Bd.A92. S.89.

6. Иванцов Г.П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // Докл. АН СССР. 1951. Т. 81. № 2. С. 179–182.
7. Иванцов Г.П. О росте сферического и иглообразного кристаллов бинарного сплава // Докл. АН СССР. 1952. Т. 83. № 4. С. 574–576.
8. Иванцов Г.П. Тепловые и диффузионные процессы при росте кристаллов // Рост кристаллов. М.: Изд-во АН СССР, 1957. Т. 1. С. 98–109.
9. Иванцов Г.П. Некоторые вопросы тепловой стороны процесса кристаллизации слитка // Физико-химические основы производства стали. М.: Изд-во АН СССР, 1957. С. 749–764.
10. Tiller W.A., Jackson K.A., Rutter J.W., Chalmers B. The Redistribution of Solute Atoms during the Solidification of Metals // Acta Metallurgica. 1953. Vol.1. P. 428–437.
11. Tiller W.A., Rutter J.W. The Effect of Growth Conditions upon the Solidification of a binary Alloy // Canad. J. of Physics. 1956. Vol. 34. P. 96–115.
12. Борисов В.Т., Виноградов В.В., Сулимец И.И., Тяжелникова И.Л. Связь диффузионного переохлаждения с дендритной структурой слитка // Непрерывное литье стали. 1979. №6. С. 5–14.
13. Хворинин Н.И. Кристаллизация и неоднородность стали / Пер. с чешск. М.: Машгиз, 1958.
14. Раттер Дж.У. Структурные несовершенства, возникающие в процессе кристаллизации // Жидкие металлы и их затвердевание. М.: Metallurgizdat, 1962. С. 272–306.
15. Флемингс М. Процессы затвердевания. М.: Мир, 1977.
16. Оно А. Затвердевание металлов. М.: Metallurgiya, 1980.
17. Гуляев Б.Б. Затвердевание и неоднородность стали. Л.; М.: Metallurgizdat, 1950.
18. Петров Д.А., Буханова А.А. Изучение форм первичной кристаллизации металлов // Тр. Московск. авиационного технолог. ин-та. 1949. Вып. 7. С. 3–19.
19. Чернов А.А. Процессы кристаллизации // Современная кристаллография. Т. 3: Образование кристаллов. М.: Наука, 1980. С. 5–232.
20. Шафрановский И.И. Лекции по кристалломорфологии. М.: Высш. шк., 1968.
21. Шафрановский И.И. Кристалломорфология снежинок // Изв. вузов. Геология и разведка. 1963. № 9. С. 62–69.
22. Фракталы в физике // Тр. VI Междунар. симпозиума по фракталам в физике. М.: Мир, 1988.
23. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. М.: Наука, 1991.
24. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А. Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994.
25. Mandelbrot B.B. The fractal geometry of nature. N.-Y., 1983.
26. Peintgen H.O., Yurgens H., Saupe D. The beauty of Fractals. N.-Y., 1986.
27. Peintgen H.O., Yurgens H., Saupe D. Chaos and Fractals. N.-Y., 1992.
28. Юргенс Х., Пайнтген Х., Заупе Д. Язык фракталов // В мире науки. 1990. №10. С. 36–45.
29. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Мн.: Наука и техника, 1987.
30. Баланкин А.С. Фрактальная динамика деформируемого твердого тела // Металлы. 1992. №2. С. 41–51.
31. Иванов И.А., Дуб А.В. Применение фрактальной параметризации для моделирования процессов формирования первичной кристаллической структуры металлов // Металлы. 2005. № 4. С. 18–25.
32. Кривилев А.В. Основы компьютерной математики. М.: Изд-во «Леке-книга», 2005.