



## Analiza rozkładu bizmutu w trójwymiarowym elementarnym polu mikrodyfuzji metodą uśrednionego wielościanu Voronoia

A.A. Burbelko<sup>1</sup>, J. Początek<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Katedra Inżynierii Stopów i Kompozytów Odlewanych, Wydział Odlewnictwa,

<sup>1</sup>abur@agh.edu.pl

<sup>2</sup>poczatek@agh.edu.pl

**Słowa kluczowe:** Modelowanie Krystalizacji, Uśredniony Wielościan Voronoia, Przemiana Perytektyczna

### 1. Wstęp

Przedmiotem pracy jest opracowanie modelu matematycznego opisującego rozkład stężenia bizmutu w trójwymiarowym *elementarnym polu mikrodyfuzji* (EPMD). W tym celu zastosowano zasady statystycznej teorii krystalizacji [1]. Model uwzględnia wpływ losowego charakteru kontaktów sąsiednich ziaren na kształt EPMD.

W celu określenia obszaru na którym będą przeprowadzane obliczenia użyto Uśrednionego Wielościanu Voronoia. Mikrostruktura Voronoi jest topologicznie równoważna mikrostrukturze metali. Każda komórka spełnia, tak jak i pojedyncze ziarno, twierdzenie Eulera  $V - E + F = 2$  i zależność  $V = 2F - 4$  ( $V$ ,  $E$ ,  $F$  oznaczają odpowiednio: liczbę wierzchołków, krawędzi i ścian komórki) [2].

### 2. Opis modelu

Zgodnie z [1] podczas natychmiastowego zarodkowania  $n$  ziaren na jednostkę objętości i ich sferycznego wzrostu z jednakową (ale niekoniecznie stałą prędkością) średnia objętość ziarna w odległości  $r$  od środka zarodka jest wyznaczona jako:

$$V(r) = \frac{1}{n} \left( 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi nr^3\right) \right) \quad (1)$$

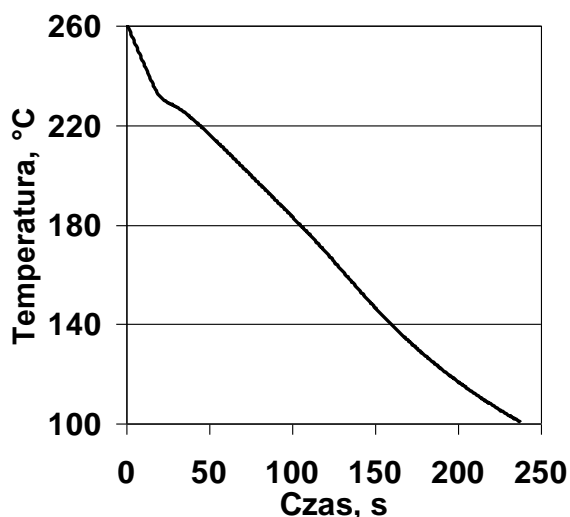
Pole powierzchni oddzielające obszar wewnętrzny od obszaru zewnętrznego może być wyznaczane jako:

$$F(r) = \frac{dV(r)}{dr} = 4\pi r^2 \cdot \exp\left(-\frac{4}{3}\pi nr^3\right) \quad (2)$$

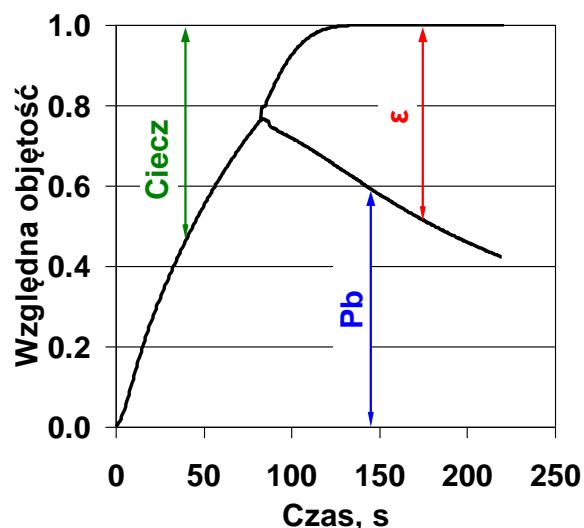
Do rozwiązania równania różniczkowego opisującego rozkład stężenia zastosowano metodę bilansów elementarnych oraz centralny iloraz różnicowy ze schematem jawnym.

### 3. Wyniki modelowania

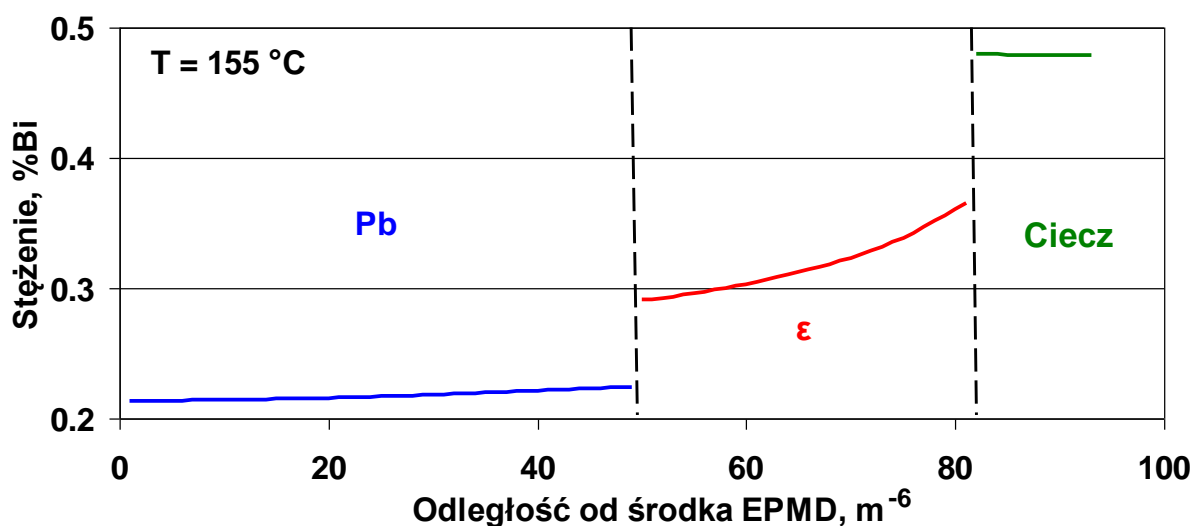
Modelowanie zostało przeprowadzone dla stopu nadperytektycznego Pb–33%Bi. Na rysunku 1 przedstawiony został fragment krzywej chłodzenia uzyskany z modelowania. Rysunek 2 pokazuje zmianę objętości względniej poszczególnych faz w trakcie krystalizacji. Na rysunku 3 przedstawiony został rozkład stężenia bizmutu w przekroju ziarna w temperaturze  $T = 155$  °C.



Rys. 1. Fragment krzywej chłodzenia odlewu



Rys. 2. Zmiana objętości względnej poszczególnych faz w trakcie krystalizacji



Rys. 3. Rozkład stężeń bizmutu w fazie pierwotnej (Pb), peritektycznej ( $\epsilon$ ) oraz w cieczy dla temperatury 155 °C

#### 4. Wnioski

1. Opracowany został model matematyczny dyfuzji bizmutu, podczas krystalizacji stopu Pb – Bi z wykorzystaniem elementarnego pola mikrodyfuzji na podstawie zasady statystycznej teorii krystalizacji.
2. W symulacji uzyskano rozkład stężenia bizmutu wzdłuż promienia ziarna, oraz zmianę objętości poszczególnych faz w trakcie krystalizacji.

#### Podziękowania

Badania przeprowadzono w ramach pracy statutowej AGH nr 15.11.170.449.

#### Literatura

- [1] Kolmogorov A.N. On the Statistical Theory of Metal Crystallization. *Bull. Acad. Sci. USSR.*, 3, 1937, s. 355-359.
- [2] Kumar S. Kurtz S., Monte-Carlo Study of Angular and Edge Length Distribution in Three-Dimensional Poisson–Voronoi Tessellation. *Mater. Charact.*, 34, 1995, s.15-27.