

Spis treści

Streszczenie	7
Summary	8
Wykaz ważniejszych oznaczeń	9
Wstęp	11
1. Metody modelowania krystalizacji	13
1.1. Wprowadzenie	13
1.2. Modelowanie makro (modelowanie pola temperatury)	15
1.3. Modelowanie struktury w skali mikro	17
1.3.1. Charakterystyka ogólna	17
1.3.2. Obliczenie objętości przemienionej	21
1.3.3. Kształt cząstek w mikromodelowaniu	22
1.3.4. Ograniczenia metody mikromodelowania	22
1.4. Modelowanie w skali mezo	24
1.4.1. Rozwiązania analityczne	24
1.4.2. Wykorzystanie metod numerycznych	26
1.4.3. Przegląd zastosowania automatów komórkowych	27
1.4.3.1. Część dyskretna automatów komórkowych	28
1.4.3.2. Dyfuzja ciepła i masy	29
1.4.3.3. Źródła masy i ciepła	30
1.4.3.4. Równowaga lokalna na granicy międzyfazowej	31
1.4.3.5. Równowagowa temperatura likwidus	31
1.4.3.6. Krzywizna powierzchni	32
1.4.3.7. Kierunek normalny do powierzchni międzyfazowej	33
1.4.3.8. Prędkość migracji granicy międzyfazowej	34
1.4.3.9. Udział fazy stałej w komórkach interfejsu	35
1.4.3.10. Anizotropia napięcia powierzchniowego	36
1.4.3.11. Zarodkowanie ziaren	37
1.5. Nanomodelowanie. Metoda pola fazowego	37
1.5.1. Podstawy teoretyczne metody pola fazowego	37
1.5.2. Modelowanie wzrostu dendrytów	41
2. Aktualny stan badań i cele pracy	43

3. Dyfuzyjno-kinetyczny automat komórkowy do modelowania krystalizacji	45
3.1. Opis modelu	45
3.1.1. Klasyfikacja komórek i reguły przechwytywania	45
3.1.2. Transport ciepła i masy	47
3.1.3. Kierunek i krzywizna granicy międzyfazowej	49
3.1.4. Prędkość migracji granicy międzyfazowej	51
3.1.5. Szybkość przemiany	55
3.1.6. Rozwiązywanie układu równań modelowych	56
3.2. Przykłady wykorzystania modelu	58
3.2.1. Parametry materiałowe i warunki modelowania	58
3.2.2. Modelowanie wzrostu zarodków	59
3.2.3. Modelowanie wpływu przechłodzenia na wzrost dendrytów	64
3.2.4. Wpływ współczynnika kinetycznego na strukturę	67
3.2.5. Wpływ parametrów granicy międzyfazowej na wzrost dendrytyczny	67
3.3. Porównanie modelowanej i eksperymentalnej struktury dwuwymiarowych dendrytów	72
3.4. Modelowanie wzrostu wielu ziaren	79
4. Podsumowanie i wnioski	86
Literatura	88