

Transport masy w przemianach fazowych na migrujących granicach wydzieleni nieciągłych-eksperyment vs. modelowanie.

Jednym z najważniejszych sposobów transportu masy jest dyfuzja na granicach ziarna (GB). Dyfuzja na GB odgrywa decydującą rolę w szeregu technologicznych procesów, będących podstawą produkcji zaawansowanych materiałów metalicznych i ceramicznych znajdujących zastosowanie w elektronice, energetyce oraz przemyśle nuklearnym. Z drugiej strony procesy dyfuzji na GB występują w szerokim zakresie podczas pracy różnych elementów. Wystarczy wspomnieć tylko zjawisko likwacji w stalach austenitycznych pracujących w podwyższonych temperaturach, dyfuzji i migracji GB materiałów poddanych napromieniowaniu oraz w powłokach Fe-Zn stosowanych w przemyśle motoryzacyjnym w celu zapobieżenia korozji. Również czynniki prowadzące do elektromigracji i degradacji złącz elektronicznych mają swoje podłoże w dyfuzji i migracji. Dlatego też, znajomość parametrów dyfuzji na GB stanowi istotny czynnik gwarantujący sukces w projektowaniu tych materiałów.

Najbardziej reprezentatywnymi przykładami przemian fazowych kontrolowanych dyfuzją na GZ są wydzielanie nieciągłe (DP) i rozpuszczanie nieciągłe (DD). Łączą one w sobie dwa zjawiska, tj. wydzielanie nowej fazy i jednoczesną migrację GB dużego kąta (front reakcji-RF). Były one w przeszłości przedmiotem intensywnych badań, które pozwoliły na stwierdzenie, że nie ma różnic w szybkości dyfuzji na stacjonarnej i migrującej granicy ziarna. Jednakże szereg zjawisk towarzyszących DP i DD nie udało się wyjaśnić. Dramatyczny postęp w możliwościach badawczych nowoczesnej infrastruktury, jaki miał miejsce w ostatnich 10-15 latach, zwłaszcza w odniesieniu do transmisyjnej i skaningowej mikroskopii elektronowej, stwarza realne szanse na powrót do większości nierozwiązanych problemów DP i DD. Co więcej, zastosowanie symulacji atomistycznych i modeli skali mezoskopowej stanowi dodatkowy czynnik pomocny w dyskusji i analizie danych eksperymentalnych, jak również uzyskanie głębszego wglądu w zjawiska fizyczne. Dlatego też, głównym celem naukowym projektu jest poznanie i zrozumienie mechanizmu oraz kinetyki transportu masy podczas procesów wydzielania i rozpuszczania nieciągłego w ujęciu metod symulacji atomistycznych w konfrontacji z nowo uzyskanymi danymi eksperymentalnymi w oparciu o trzy przyjęte hipotezy badawcze:

- a) migrujący RF wydzieleni nieciągłych posiada pewną wewnętrzną zdolność do lokalnego skorygowania kształtu frontu reakcji prowadzącą do zbilansowania sił działających na froncie poprzez morfologiczne modyfikacje, jak: zmiana kształtu RF, zarodkowanie wtórne i rozgałęzianie płytkowych wydzieleni nowej fazy β , niestabilizowany wzrost (*-stop and -go*) lub nawet cofanie się RF. Wszystkie te modyfikacje są ściśle związane ze sposobem transportu masy na RF.
- b) „historia” materiału zachowana w wydzieleniach nieciągłych determinuje przebieg procesu DD, zwłaszcza poprzez tworzenie tzw. „obrazów ducha” (ang. *ghost images*) uprzednich położeni RF oraz płytek wydzielonej fazy β . Ponownie, sposób transportu masy jest kluczowym w zrozumieniu niestabilizowanej migracji RF.
- c) model skali mezoskopowej w połączeniu z symulacjami atomistycznymi pozwoli wyjaśnić relacje między transportem masy, a zmianami strukturalnymi zachodzącymi wzdłuż i przez RF podczas DP i DD, jak również lepiej zobrazować zjawisko fizyczne determinujące szybkości reakcji przemiany.

Wyniki uzyskane w projekcie będą mieć istotne znaczenie dla dalszego postępu w rozwiązaniu problemu uzyskania kontroli i możliwości projektowania typu granic ziaren i granic międzyfazowych, aby móc przewidywać zachowanie się materiału podczas eksploatacji. Z drugiej strony przyczynią się do projektowania nowych kompozytowych materiałów, ponieważ w określonych przypadkach wydzielanie nieciągłe może być wykorzystane do kształtowania pożądanych cech materiałów takich jak, drobne ziarno czy lepsza przewodność elektryczna. Zastosowanie różnorodnych metod atomistycznych pomoże poprawić opis zjawisk fizycznych, które mają wpływ na mikrostrukturę produktu dwufazowego.