

Topnienie i krystalizacja są przemianami polegającymi na przejściu materii między stanem uporządkowanym a nieuporządkowanym. Podczas topnienia, krystaliczne ciało stałe, w którym atomy tworzą regularną strukturę, zamienia się w nieuporządkowaną strukturalnie ciecz. Krystalizacja cieczy (nazywana czasem zestaleniem) jest procesem odwrotnym, w którym nieporządek atomowy przeradza się w stan uporządkowany. Oba powyższe procesy są od dawna badane przez fizyków. Topnienie lodu i zamarzanie wody należą do doświadczenia dnia powszedniego. Z kolei topnienie i zestalenie metali są podstawowymi procesami w nauce o materiałach gdyż są związane z istotnymi procesami technologicznymi takimi jak np. odlewanie lub spawanie. Według szeroko rozpowszechnionej opinii, topnienie i zestalenie następują w tej samej temperaturze. Istotnie – gdy temperatura powietrza spada poniżej 0 stopni Celsjusza, można spodziewać się pojawienia się lodu na drodze. Lód jednak stopi się, gdy temperatura wzrośnie powyżej zera. W bardziej ogólnym przypadku, temperatura w której zamarza ciecz nie jest jednak równa temperaturze topnienia kryształu. Odwołując się do przykładu wspomnianej powyżej wody, chmury powstające na znacznej wysokości składają się z kropelek ciekłej wody, której temperatura może wynosić nawet -15°C . Zjawisko polegające na istnieniu cieczy poniżej nominalnej temperatury krzepnięcia nosi nazwę przechłodzenia i jest wspólną cechą niemal wszystkich cieczy. Co ciekawe, efekt odwrotny, polegający na przegrzaniu kryształu powyżej temperatury topnienia jest niezwykle trudny do zaobserwowania, gdyż wymaga niezwykle szybkiego ogrzewania, które pozwala niejako wyprzedzić proces topnienia. Co więcej, podczas zwykłego, powolnego ogrzewania, zamiast przegrzania, obserwuje się topnienie powierzchniowe ciał stałych zachodzące poniżej temperatury topnienia. Ta ciekawa asymetria topnienia i krystalizacji wynika z ich różnych mechanizmów mikroskopowych. Mechanizmy te są dobrze poznane dla sytuacji gdy ogrzewanie lub chłodzenie, a co za tym idzie topnienie i krystalizacja, przebiegają powoli. Jednak w przypadku bardzo szybkich zmian temperatury, które mogą prowadzić do powstania stanów głębokiego przegrzania bądź przechłodzenia, topnienie i krystalizacja przebiegają na tyle szybko, że doświadczalne zweryfikowanie przewidywań modeli teoretycznych staje się poważnym wyzwaniem. Skala czasowa procesów zachodzących w tym zakresie jest mierzona w pikosekundach – bilionowych częściach sekundy. Dla tak krótkich czasów, metody doświadczalne, dla których typowy czas pomiaru jest rzędu sekund, lub nawet godzin, stają się bezużyteczne. W niniejszym projekcie zamierzamy ominąć powyższe ograniczenie wykorzystując najnowocześniejsze techniki badawcze i podejście znane jako pompa-sonda do zbadania ultra szybkiego topnienia i krystalizacji wybranych czystych metali. Zasadniczym elementem proponowanej metody jest oświetlenie cienkiej warstwy badanego materiału niezwykle krótkim, trwającym poniżej jednej pikosekundy, impulsem lasera emitującego światło widzialne. Warstwa, która zaabsorbuje taki impuls ulega gwałtownemu, sięgającemu 10^{14} (sto bilionów) stopni na sekundę, ogrzewaniu, a następnie schłodzeniu z szybkością rzędu 10^{12} (bilion) stopni na sekundę. W trakcie planowanych pomiarów będziemy rejestrować strukturę próbki oświetlając ją drugim, równie krótkim impulsem, lecz tym razem nie światła widzialnego, a promieniowania rentgenowskiego lub elektronów. Drugi impuls będzie opóźniony względem pierwszego o tyle, by jego oddziaływanie z próbką następowało w trakcie jej ogrzewania lub chłodzenia. Rejestracja rozkładu przestrzennego promieni rentgenowskich lub elektronów rozproszonych na atomach próbki umożliwi szczegółowe, klatka po klatce, prześledzenie przebiegu ultraszybkich procesów topnienia i krystalizacji. Efektem naszych badań będzie określenie granic przegrzania/przechłodzenia metali, a także wyznaczenie prędkości przemieszczania się frontu topnienia i krystalizacji. Co więcej, pomiary przeprowadzone dla metali różniących się strukturą krystaliczną umożliwią skorelowanie jej z mechanizmami przemiany kryształ-ciecz i ciecz-kryształ. W tym celu porównamy nasze dane eksperymentalne z symulacjami komputerowymi przeprowadzonymi metodą tzw. dynamiki molekularnej. Symulacje te modelują one ruchy atomów wywołane ich wzajemnymi oddziaływaniami, dzięki czemu możliwe jest badanie zmian struktury materiałów. Symulacje zostaną przeprowadzone dla układów o charakterystycznym wymiarze odpowiadającym grubości badanych eksperymentalnie i składających się z ok. miliona atomów, a czas symulacji będzie porównywalny z rzeczywistą skalą czasową badanych eksperymentalnie procesów, tj. od piko do nanosekund. Oczekujemy, iż nasze wyniki rzucą nowe światło na przebieg zachodzących szybko procesów topnienia i krystalizacji.