

УДК 548.232.4

ЛОКАЛЬНО-НЕРАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА ЧАСТЬ 2. ФОРМИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО ПОТОКА НА ПОВЕРХНОСТИ ДЕНДРИТА

О. Н. ШАБЛОВСКИЙ, Д. Г. КРОЛЬ, И. А. КОНЦЕВОЙ

Учреждение образования «Гомельский государственный
технический университет имени П. О. Сухого»,
Республика Беларусь

Ключевые слова: переохлажденный расплав, рост кристалла, предвестник боковой ветви дендрита, неравновесный теплоперенос.

Введение

Продолжим исследование [1] пространственной структуры теплового поля на фазовой границе (ФГ) высокоскоростной кристаллизации однокомпонентного чистого переохлажденного расплава. В данной работе мы развиваем наши исследования [2]–[5], изучаем закономерности формирования локально-неравновесных температурных полей на границе раздела «расплав – твердая фаза».

Цель второй части статьи: выполнить сравнительный анализ тепловых процессов, происходящих при кристаллизации никеля, меди и германия; построить трехмерный ортогональный базис на поверхности роста кристалла; изучить закономерности распределения теплового потока в нормальном и касательном к ФГ направлениях.

Кристаллизация меди

Выполним сопоставительный анализ результатов расчетов кристаллизации никеля (см. [1]) и меди (рис. 1–3). Были приняты следующие значения теплофизических параметров меди:

$$T_c = 1357 \text{ К}; T_* = 1177 \text{ К}; L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3;$$

$$c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}; U = 1,351 \text{ Дж/м}^2; \lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)};$$

$$\gamma = 4,557 \cdot 10^{-8} \text{ с}; \mu = 10,056 \text{ м/(с} \cdot \text{К)}; b_1 = 39 \text{ м/с}; y_1 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}.$$

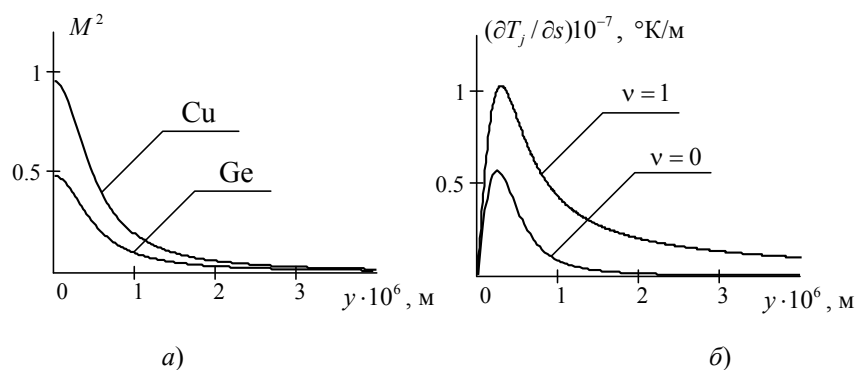


Рис. 1. Свойства вершины дендрита: а – квадрат теплового числа Маха для меди и германия; б – касательная компонента градиента температуры при кристаллизации меди

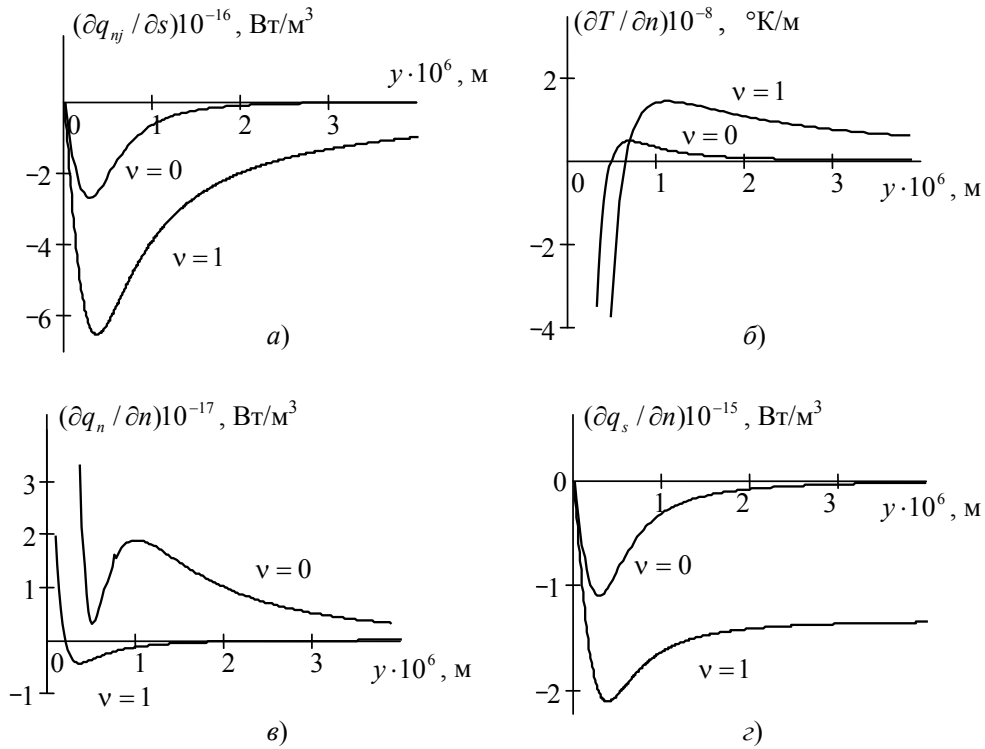


Рис. 2. Кристаллизация меди: влияние типа симметрии на двухмерную структуру теплового поля

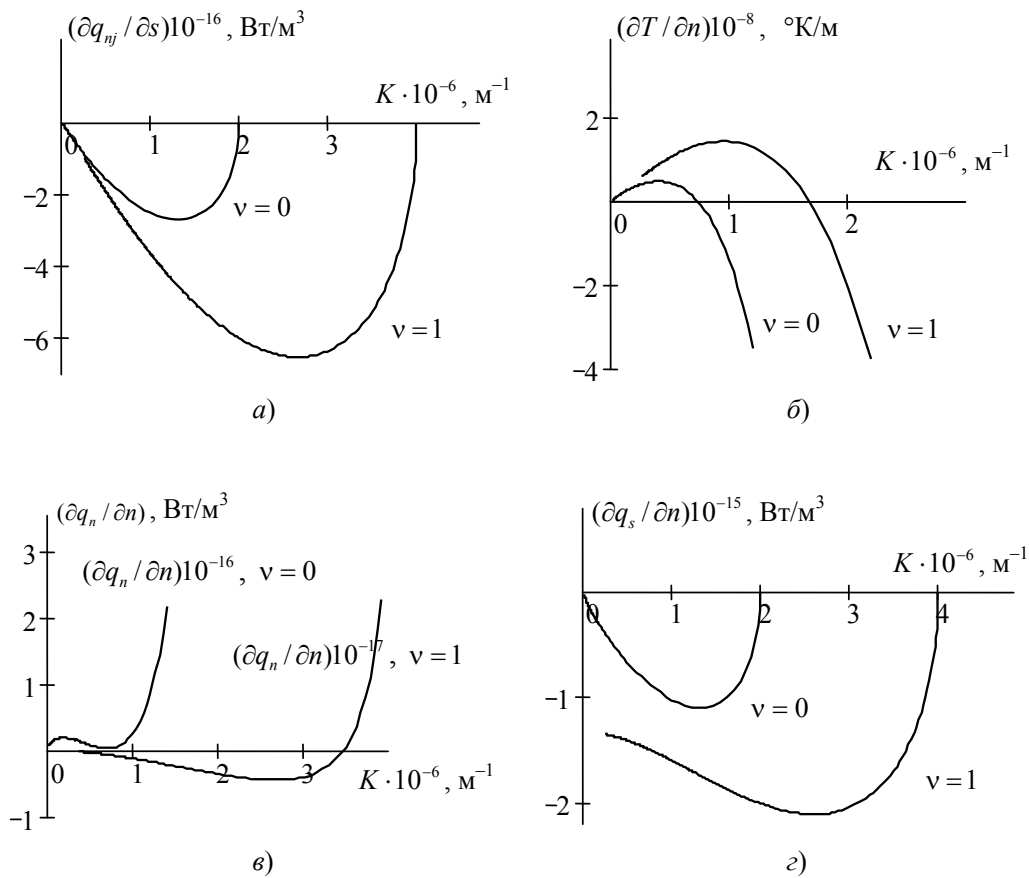


Рис. 3. Кристаллизация меди: влияние кривизны вершины дендрита на градиентные свойства температуры и теплового потока

Расчеты показали, что при кристаллизации меди на фазовой границе отсутствует переход через «звуковую» точку: процесс всюду дозвуковой, $M^2 < 1$ (рис. 1, *a*). Зависимости q_{nj} , $\partial N / \partial s$, $\partial T_j / \partial s$ от поперечной координаты y для меди и никеля в качественном отношении одинаковые. Качественное сходство наблюдается также для $\partial q_{nj} / \partial s$, $\partial q_s / \partial n$ от K : это видно из сравнения рис. 3, *a, z* и рис. 4, *a, б* из [1]. Принципиальные различия между этими металлами видны на рис. 3, *б, в* и рис. 5 из [1], а именно: для меди отсутствует разрыв нормальных производных $\partial q_n / \partial n$ и $\partial T / \partial n$. Кривизна вершины дендрита проявляет себя одинаково для меди и никеля; этот вывод относится к функциям M^2 , q_{nj} , $\partial N / \partial s$, $\partial T_j / \partial s$ аргумента K . Ясно, что наиболее серьезные различия наблюдаются для производных $\partial q_n / \partial n$ и $\partial T / \partial n$, рассматриваемых как функции кривизны K [1, рис. 3 и 5]. В частности, следует обратить внимание на наличие для меди максимума и минимума зависимости $\partial q_n / \partial n$ от K (рис. 3, *в*). Рисунок 2 демонстрирует отчетливо выраженную немонотонность производных $\partial / \partial s$ и $\partial / \partial n$ в малой, но конечной окрестности вершины дендрита.

Кристаллизация германия

Фазовая граница кристаллизации германия изучена при следующих значениях теплофизических параметров:

$$T_c = 1210 \text{ К}; T_* = 991 \text{ К}; L = 2,54 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3;$$

$$c = 2,048 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}; U = 0,6 \text{ Дж/м}^2; \lambda = 17,4 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)};$$

$$\gamma = 2,002 \cdot 10^{-7} \text{ с}; \mu = 1,08 \text{ м/(с} \cdot \text{К)}; b_1 = 4,5 \text{ м/с}; y_1 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}.$$

Двухмерная плоская либо осесимметричная фазовые границы тоже не содержат звуковую точку $M^2 = 1$. Именно это обстоятельство обеспечивает ее качественное сходство с процессом кристаллизации меди; по этой же причине наблюдаются существенные отличия градиентных свойств тепловых полей германия и никеля (см. [1]). Качественные свойства и количественные характеристики процесса высокоскоростной кристаллизации германия показаны на рис. 4 и 5.

Результаты, представленные на рис. 1–5, демонстрируют, до какой степени различными являются числовые значения функций, определяющих структуру локально-неравновесного теплового поля на ФГ кристаллизации переохлажденных расплавов меди и германия. Это значит, что числовые значения входных параметров процесса весьма существенным образом влияют на пространственную неоднородность теплового поля в окрестности вершины дендрита.

Обращает на себя внимание нетривиальное поведение производной от температуры по нормальной координате $\partial T / \partial n$. Для меди эта производная есть знакопеременная функция координаты y при $v = 0, 1$. Это значит, что на конечном удалении от вершины дендрита при фиксированном значении кривизны имеем $\partial T / \partial n = 0$ (рис. 3, *б*). Для германия значение $\partial T / \partial n = 0$ наблюдается только при осевой симметрии (рис. 5, *б*); для плоской ФГ имеем $\partial T / \partial n < 0$.

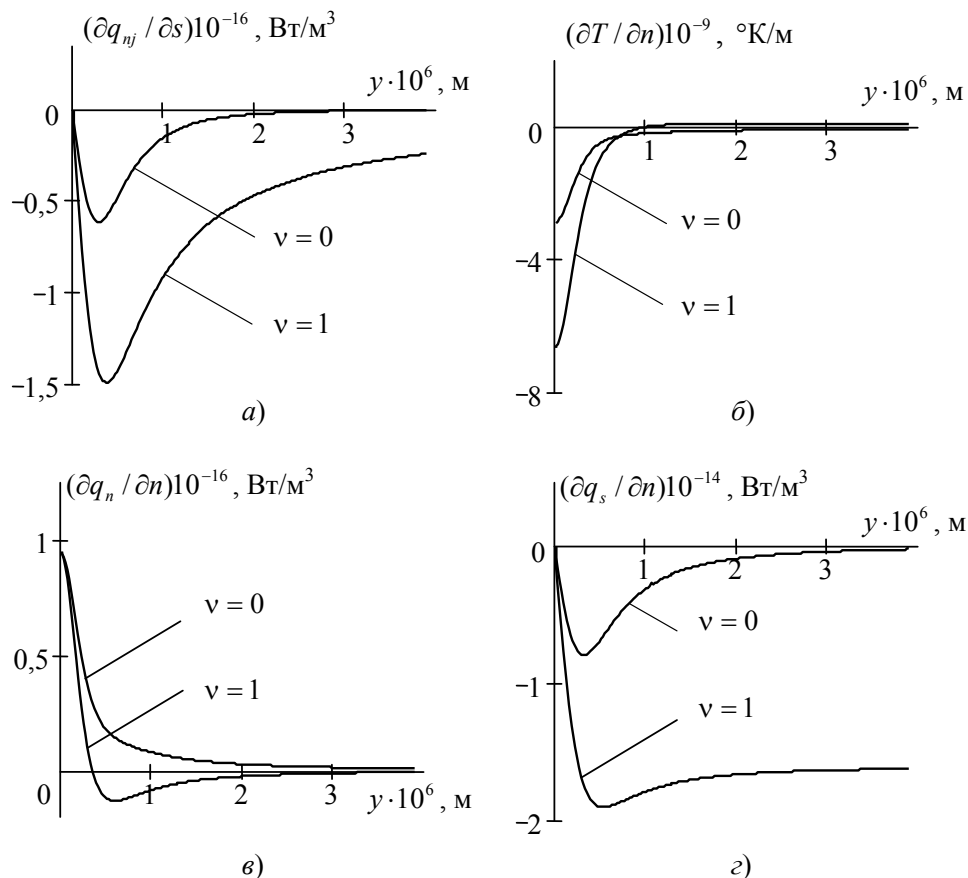


Рис. 4. Кристаллизация германия: влияние типа симметрии на двухмерную структуру теплового поля

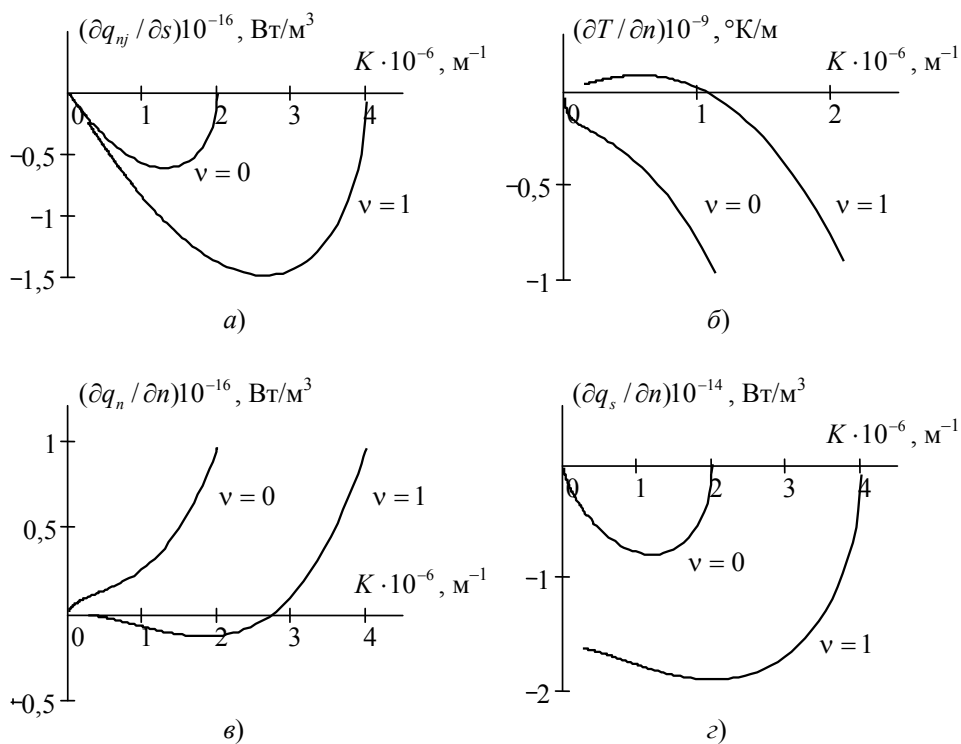


Рис. 5. Кристаллизация германия: влияние кривизны вершины дендрита на градиентные свойства температуры и теплового потока

Еще одной важной характеристикой градиентных свойств теплового поля является производная от нормального к ФГ теплового потока по нормальной координате $\partial q_n / \partial n$. Для германия при $v = 0$ эта производная положительна (рис. 4, в) и монотонно убывает при уменьшении кривизны (рис. 5, в). Ситуация меняется, если граница обладает осевой симметрией: по мере удаления от вершины дендрита производная $\partial q_n / \partial n$ меняет знак с «плюса» на «минус». Такое же поведение $\partial q_n / \partial n$ наблюдается для меди (рис. 3, в).

Ортогональные координаты на фазовой границе

Продолжим исследование ортогонального базиса \mathbf{s} , \mathbf{n} , \mathbf{b} , соответствующего касательной, главной нормали и бинормали к поверхности ФГ [1]. Рассматриваем трехмерное пространство $x_1 = x + b_1 t$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. Уравнение ФГ имеет вид $f(x_1, x_2, x_3) = 0$.

Ортогональные координаты ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 вводим следующим образом: берем $\xi_3 = f(x_1, x_2, x_3)$. Единичные векторы \mathbf{s} , \mathbf{b} указывают направления осей, соответствующих координатам ξ_1 , ξ_2 . Задача состоит в том, чтобы найти функции $\xi_m = \xi_m(x_1, x_2, x_3)$, $m = 1, 2, 3$, удовлетворяющие требованиям ортогональности $\mathbf{s} = \mathbf{n} \times \mathbf{b}$ [6].

Для радиус-вектора $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$ имеем:

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi_m} d\xi_m = \mathbf{e}_m d\xi_m = \mathbf{i}_\alpha dx_\alpha; \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad (1)$$

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{s} h_1, \quad \mathbf{e}_2 = \mathbf{b} h_2, \quad \mathbf{e}_3 = \mathbf{n} h_3.$$

Здесь суммирование проводится по повторяющемуся индексу. Нетрудно видеть, что

$$\mathbf{b} = \frac{\mathbf{q}_* \times \mathbf{G}}{k_*},$$

$$k_* = q_* G \cdot \cos \beta_* = [q_*^2 G^2 - (\mathbf{q}_* \cdot \mathbf{G})^2]^{1/2}; \quad \mathbf{s} = \frac{1}{k_* G} [\mathbf{q}_* G^2 - (\mathbf{q}_* \cdot \mathbf{G}) \mathbf{G}].$$

Для дальнейших вычислений нам потребуются следующие величины:

$$a_{\alpha 1} = \mathbf{i}_\alpha \mathbf{s}, \quad a_{\alpha 2} = \mathbf{i}_\alpha \mathbf{b}, \quad a_{\alpha 3} = \mathbf{i}_\alpha \cdot \mathbf{n} = \mathbf{i}_\alpha \cdot \frac{\mathbf{G}}{G} = \frac{\partial f / \partial x_\alpha}{G}; \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2)$$

После аналитических преобразований находим:

$$a_{\alpha 1} = \frac{1}{k_* G} \left[q_{*\alpha} G^2 - (\mathbf{q}_* \cdot \mathbf{G}) \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \right]; \quad \alpha = 1, 2, 3;$$

$$a_{12} = \frac{1}{k_*} \left[q_{*2} \frac{\partial f}{\partial x_3} - q_{*3} \frac{\partial f}{\partial x_2} \right] = 0;$$

$$a_{22} = \frac{1}{k_*} \left[q_{*3} \frac{\partial f}{\partial x_1} - q_{*1} \frac{\partial f}{\partial x_3} \right] = -\frac{q_*}{k_*} \frac{\partial f}{\partial x_3}; \quad a_{32} = \frac{1}{k_*} \left[q_{*1} \frac{\partial f}{\partial x_2} - q_{*2} \frac{\partial f}{\partial x_1} \right] = \frac{q_*}{k_*} \frac{\partial f}{\partial x_2}.$$

Взяв формулу (1) при $m = 1$, запишем, учитывая (2): $e_1 d\xi_1 \cdot s = i_\alpha dx_\alpha \cdot s$. Отсюда выводим:

$$d\xi_1 = \frac{1}{h_1} a_{\alpha 1} dx_\alpha.$$

Аналогично получаем при $m = 2, m = 3$:

$$d\xi_2 = \frac{1}{h_2} a_{\alpha 2} dx_\alpha; \quad d\xi_3 = \frac{1}{h_3} a_{\alpha 3} dx_\alpha.$$

Наряду с этим возьмем полные дифференциалы: $d\xi_m = \frac{\partial \xi_m}{\partial x_\alpha} dx_\alpha$.

Следовательно, имеем равенства:

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial x_\alpha} = \frac{a_{\alpha 1}}{h_1}; \quad \frac{\partial \xi_2}{\partial x_\alpha} = \frac{a_{\alpha 2}}{h_2}; \quad \frac{\partial \xi_3}{\partial x_\alpha} = \frac{a_{\alpha 3}}{h_3}. \quad (3)$$

Последняя из этих формул дает: $h_3 = G^{-1}$.

Вывод: чтобы найти функции $\xi_1(x_\alpha)$, $\xi_2(x_\alpha)$, нужно решить уравнения (3). Для этого нужно знать $h_1(x_\alpha)$, $h_2(x_\alpha)$: выбор именно этих функций обеспечивает существование полных дифференциалов $d\xi_m$. Таким образом, задача сводится к удовлетворению условий равенства смешанных производных второго порядка для функций $\xi_1(x_\alpha)$, $\xi_2(x_\alpha)$:

$$\frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_2 \partial x_1}; \quad \frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_2 \partial x_3} = \frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_3 \partial x_2}; \quad \frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_3 \partial x_1} = \frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_1 \partial x_3}, \quad m = 1, 2.$$

Подставляя сюда (3), получаем три линейных дифференциальных уравнения в частных производных первого порядка для искомой функции $H_m = \ln h_m$:

$$\left. \begin{aligned} a_{2m} \frac{\partial H_m}{\partial x_1} - a_{1m} \frac{\partial H_m}{\partial x_2} &= s_{12}^{(m)}; \\ a_{3m} \frac{\partial H_m}{\partial x_1} - a_{1m} \frac{\partial H_m}{\partial x_3} &= s_{13}^{(m)}; \\ a_{3m} \frac{\partial H_m}{\partial x_2} - a_{2m} \frac{\partial H_m}{\partial x_3} &= s_{23}^{(m)}, \quad m = 1, 2; \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$s_{12}^{(m)} = \frac{\partial a_{2m}}{\partial x_1} - \frac{\partial a_{1m}}{\partial x_2}; \quad s_{13}^{(m)} = \frac{\partial a_{3m}}{\partial x_1} - \frac{\partial a_{1m}}{\partial x_3}; \quad s_{23}^{(m)} = \frac{\partial a_{3m}}{\partial x_2} - \frac{\partial a_{2m}}{\partial x_3}.$$

Вместе с тем уравнения (4) – это алгебраическая система линейных неоднородных уравнений по отношению к производным $\partial H_m / \partial x_\alpha$. Она имеет нулевой определитель. Необходимое и достаточное условие совместности этих алгебраических уравнений дает связь между коэффициентами $a_{\alpha m}$:

$$a_{1m} s_{23}^{(m)} - a_{2m} s_{13}^{(m)} + a_{3m} s_{12}^{(m)} = 0, \quad m = 1, 2. \quad (5)$$

Это соотношение можно представить в виде

$$a_{2m}^2 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{a_{3m}}{a_{2m}} \right) + a_{3m}^2 \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{a_{1m}}{a_{3m}} \right) + a_{1m}^2 \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\frac{a_{2m}}{a_{1m}} \right) = 0, \quad m = 1, 2.$$

Математические возможности построения в конечном виде решений дифференциальных уравнений (3), (4) зависят от того, насколько удачно выбрана функция $f(x_\alpha)$. Этот вопрос требует отдельного рассмотрения. Здесь для нас важно, что условие совместности (5) выполнено тождественным образом, если ФГ двухмерная плоская либо двухмерная осесимметричная. Именно эти два варианта были изучены нами в первой части данной работы.

Трехмерные свойства теплового потока

Обсудим вопрос о влиянии морфологических свойств поверхности роста на характер распределения теплового потока $q_* = q_*^{(s)} + q_*^{(n)}$, поступающего из жидкой к твердой фазе. Для касательной и нормальной компонент имеем формулы:

$$q_*^{(s)} = q_* \cdot \cos \beta_*; \quad q_*^{(n)} = q_* \cdot \sin \beta_*$$

(см. в [1] формулы (3), (4) и рис. 1). Пусть поверхность ФГ имеет вид $f(x, y, z, t = t_0) = 0$, $t_0 \geq 0$, тогда с учетом предыдущих построений запишем:

$$\sin \beta_* = \frac{\partial f / \partial x}{|\text{grad } f|}, \quad |\text{grad } f| = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2};$$

$$\cos \beta_* = [1 - \sin^2 \beta_*]^{1/2} = \frac{\left[\left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2}}{|\text{grad } f|}.$$

Рассмотрим три характерных примера поверхности роста.

Пример 1. Эллиптический параболоид:

$$f \equiv x - \frac{y^2}{2A_2} - \frac{z^2}{2A_3} = 0; \quad A_2 > 0, \quad A_3 > 0. \quad (6)$$

Пример 2. Двуполостный гиперболоид:

$$f \equiv \frac{x^2}{A_1^2} - \frac{y^2}{A_2^2} - \frac{z^2}{A_3^2} - 1 = 0. \quad (7)$$

Здесь мы работаем с одной из двух разобщенных полостей.

Пример 3. Эллипсоид:

$$f \equiv \frac{x^2}{A_1^2} + \frac{y^2}{A_2^2} + \frac{z^2}{A_3^2} - 1 = 0. \quad (8)$$

Расчеты проведены в безразмерных переменных и представлены на рис. 6–8. Хорошо видно, что по мере возрастания кривизны на вершине дендрита резко увеличивается нормальная к поверхности роста компонента $q_*^{(n)}$. Эта закономерность отчетливо прослеживается для всех трех примеров: (6)–(8).

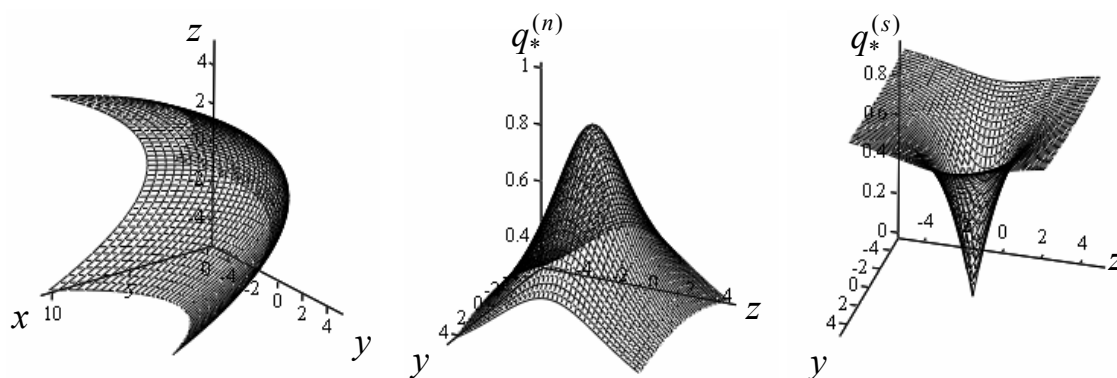


Рис. 6. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока q_* . Эллиптический параболоид (6):

$$A_2 = 0,5; A_3 = 1$$

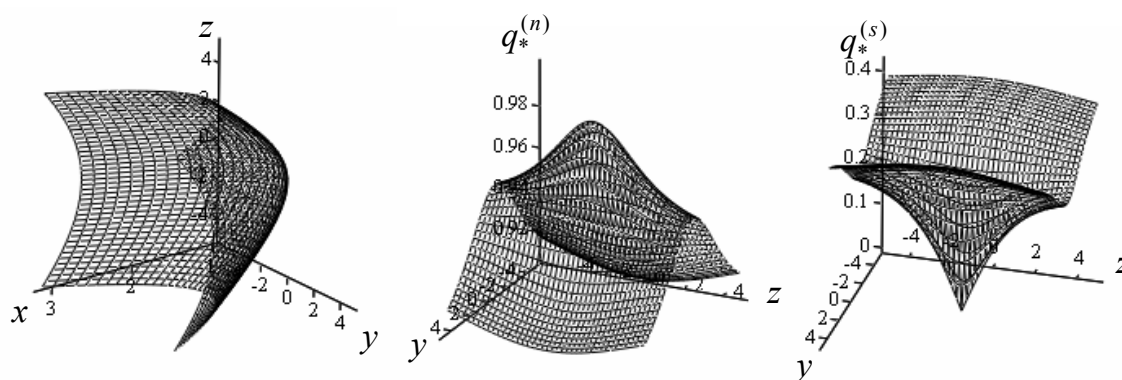


Рис. 7. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока q_* . Двухполостный гиперboloид (7):

$$A_1 = 1; A_2 = 2; A_3 = 3$$

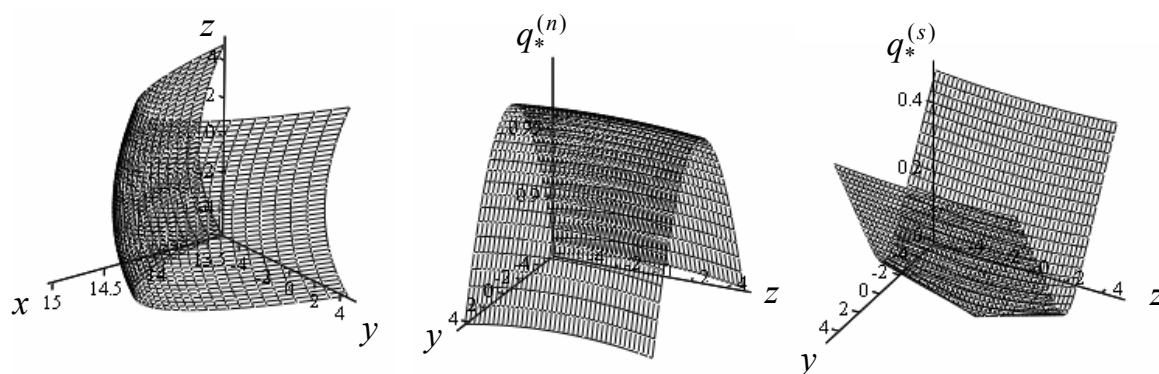


Рис. 8. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока q_* . Эллипсоид (8): $A_1 = 15; A_2 = 12; A_3 = 30$

Заключение

Обнаружены значительные качественные и количественные различия в структуре тепловых полей для трех рассмотренных веществ: никеля, меди и германия. Главное отличие фазовых границ меди и германия от никеля состоит в том, что для них процессы локально-неравновесного теплопереноса дозвуковые, отсутствует трансзвуковой переход. Именно поэтому для никеля наблюдается разрыв нормальных

производных от компонент вектора теплового потока, а для меди и германия такого разрыва нет. Вместе с тем существуют большие количественные различия между функциями, определяющими пространственную неоднородность тепловых полей меди и германия. Это означает, что числовые значения входных параметров процесса кристаллизации в значительной степени влияют на поведение теплового потока в нормальном и касательном к фазовой границе направлениях. Получены уравнения координатных линий, позволяющие анализировать двухмерные и трехмерные геометрические свойства фазовой границы. Изучен вопрос о влиянии морфологических свойств поверхности роста на характер пространственного распределения теплового потока, поступающего к твердой фазе. Численные расчеты проведены для трех примеров: эллиптический параболоид, двухполостный гиперболоид, эллипсоид. Обнаружено, что по мере возрастания кривизны на вершине дендрита резко увеличивается нормальная к поверхности роста компонента теплового потока.

В третьей, заключительной части работы будут рассмотрены эволюционные свойства фазовой границы кристаллизации, обусловленные отчетливо выраженной нестационарностью скорости и кривизны вершины дендрита.

Литература

1. Шабловский, О. Н. Локально-неравновесные свойства фазовой границы высокоскоростной кристаллизации переохлажденного расплава. Часть 1. Трансзвуковой переход на линии роста / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль, И. А. Концевой // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2017. – № 2. – С. 71–79.
2. Шабловский, О. Н. Релаксационный теплоперенос в нелинейных средах / О. Н. Шабловский. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2003. – 382 с.
3. Шабловский, О. Н. Тепловые свойства фронта кристаллизации однокомпонентного чистого переохлажденного расплава / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль // Расплавы. – 2005. – № 4. – С. 69–81.
4. Шабловский, О. Н. Расчет кинетических параметров фронта кристаллизации глубоко переохлажденного расплава / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль // Материалы, технологии, инструменты. – 2007. – Т. 12, № 1. – С. 5–10.
5. Шабловский, О. Н. Тепловая градиентная катастрофа и рост двухмерного свободного дендрита в переохлажденном расплаве / О. Н. Шабловский // Приклад. физика. – 2007. – № 3. – С. 29–37.
6. Emanuel, G. Shock wave derivatives / G. Emanuel, Min-Shan Lin // Phys. Fluids. – 1998. – Vol. 31, № 12. – P. 3625–3633.

Получено 18.10.2017 г.