

УДК 536.2.01

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ НА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Д. Г. КРОЛЬ

*Гомельский государственный технический университет
имени П. О. Сухого, Республика Беларусь*

Введение. Одним из перспективных способов формирования микроструктуры материала является процесс высокоскоростной кристаллизации (ВК). Это связано, прежде всего, с применением металлических и аморфных материалов в приборах микроэлектроники, в недорогих солнечных элементах. Знание кинетических параметров кристаллизации позволяет обеспечивать необходимую стабильность таких материалов и возможность управления изменениями структуры посредством внешних воздействий. Исследование этих процессов началось сравнительно недавно [1-3]. Имеющиеся аналитические решения релаксационных задач ВК получены для автомодельных уравнений в рамках допущения о постоянной скорости фазовой границы (ФГ).

В работах [4-6] была предложена локально-неравновесная модель теплопереноса при высокоскоростной кристаллизации материалов. Численно-аналитическая реализация этого подхода представлена в [7, 8]. Данная работа является продолжением исследований [7, 8] и посвящена численному моделированию локально-неравновесного теплопереноса в процессах направленного затвердевания. Нашей целью является решение задач о колебательном и аperiодическом затухающих во времени тепловых режимах за ФГ высокоскоростной кристаллизации.

Постановка задачи. Математическая модель локально-неравновесной тепловой системы с памятью имеет вид [4-6]:

$$\tilde{c}c \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0; \quad q + \gamma \frac{\partial q}{\partial t} = -\tilde{\lambda} \lambda \frac{\partial T}{\partial x}; \quad x \in [x_w, x_j], \quad t \geq 0; \quad (1)$$

$$x = x_j(t): q_j - q_* = \tilde{c}N(u_j - u_*) - L(N + \gamma dN / dt); \quad (2)$$

$$(q_j - q_*)N = \tilde{\lambda}(V_j - V_*); \quad N = dx_j / dt; \quad \tilde{N}^2 = \tilde{c} / \tilde{\lambda}; \quad (3)$$

$$w_*^2 < N^2 \tilde{N}^2 < (V_* - V_j) / (u_* - u_j) < w_j^2; \quad (4)$$

$$w_j^2 < N^2 \tilde{N}^2 < (V_* - V_j) / (u_* - u_j) < w_*^2; \quad (5)$$

$$\lambda / \gamma = dV / dT; \quad c = du / dT; \quad w^2 = \lambda / (c\gamma);$$

$$\tilde{\lambda} = (\lambda_b T_b) / (x_b q_b); \quad \tilde{c} = (c_b T_b x_b) / (t_b q_b); \quad L = L_b x_b / (t_b q_b);$$

$$x = x_w : T = T_w \text{ либо } q = q_w. \quad (6)$$

Основные обозначения: T – температура; q – удельный тепловой поток; λ – коэффициент теплопроводности; $c = \rho c_p$ – удельная объемная теплоемкость; γ – время релаксации теплового потока; t – время; x – декартова координата; w – скорость распространения тепловых возмущений; L_b – теплота фазового перехода единицы объема вещества; индексами $*$, j отмечены значения функций, соответственно, справа и слева от ФГ $x = x_j(t)$, x_w – левая неподвижная граница.

Система (1) составлена из уравнения энергии и уравнения для теплового потока; соотношения (2), (3) – условия динамической совместности на ФГ; цепочка неравенств (4) либо (5) характеризует устойчивость сильного разрыва теплового поля при знакопостоянной (либо знакопеременной) выпуклости функции $V(T)$ по обе стороны ФГ. Безразмерные комплексы $\tilde{\lambda}, \tilde{c}, L$ составлены из масштабов (они отмечены нижним индексом b) величин, применяемых для обезразмеривания уравнений (1) и граничных условий (2) – (6). В последующих аналитических выкладках и численных расчетах все величины – безразмерные.

Конкретизируя запись условий (2)-(5), выделяем температурные интервалы $[T_j, T_c]$ и $[T_c, T_*]$ слева и справа от точки фазового перехода $T_c \equiv const$. Теплофизические параметры среды для каждого интервала свои и описываются функциями вида $\lambda = \lambda^0 + \lambda^1 T$, $\gamma \equiv const$, а также $c = c_0 / (T_c - T)^a$, $a \in (0,1)$ и $c = \tilde{c}_0 / (T - T_c)^{\tilde{a}}$, $\tilde{a} \in (0,1)$.

Основные формулы и результаты расчетов. Решение уравнений (1) строим в зоне кристаллизации, рассматривая физически допустимые варианты установления квазистационарного режима движения ФГ: а) затухающий колебательный режим теплового поля; б) затухающий аperiodический режим теплового поля.

Применяя численно-аналитический подход [4], переходим в (1) от независимых переменных x, t к аргументам z, α, β :

$$z = x - N_0 t + l_1 \alpha + l_2 \beta + l_3 \alpha^2 + l_4 \beta^2 + l_5 \alpha \beta + l_6 \alpha^3 + l_7 \alpha^2 \beta + l_8 \alpha \beta^2 + l_9 \beta^3 + \dots; \quad l_i - const, i \geq 1;$$

а) затухающий колебательный режим теплового поля:

$$\alpha = \exp(-nt) \sin(kt + b), \quad \beta = \exp(-nt) \cos(kt + b); \quad k > n > 0; \quad b > 0;$$

б) затухающий аperiodический режим теплового поля:

$$\alpha = \alpha_0 \exp(k - n)t, \quad \beta = \beta_0 \exp(-k - n)t; \quad 0 < k < n, \quad \alpha_0, \beta_0 \in (0,1).$$

Линия $z_j = 0$ является образом ФГ. Уравнения теплопереноса (1) и граничные условия (2) – (5) удовлетворяются функциональными степенными разложениями:

$$T = T_0(z) + \alpha T_1(z) + \alpha^2 T_2(z) + \beta \Theta_1(z) + \beta^2 \Theta_2(z) + \alpha \beta \psi_2(z) + \alpha^3 T_3(z) + \beta^3 \Theta_3(z) + \alpha^2 \beta \psi_3(z) + \alpha \beta^2 \tilde{\psi}_3(z) + \dots; \quad (7)$$

$$q = q_0(z) + \alpha q_1(z) + \alpha^2 q_2(z) + \beta \aleph_1(z) + \beta^2 \aleph_2(z) + \alpha \beta \chi_2(z) + \alpha^3 q_3(z) + \beta^3 \aleph_3(z) + \alpha^2 \beta \chi_3(z) + \alpha \beta^2 \tilde{\chi}_3(z) + \dots; \quad (8)$$

$$N = N_0 + \alpha N_1 + \alpha^2 N_3 + \beta N_2 + \beta^2 N_4 + \alpha \beta N_5 + \alpha^3 N_6 + \alpha^2 \beta N_7 + \alpha \beta^2 N_8 + \beta^3 N_9 + \dots$$

Рекуррентные формулы для коэффициентов рядов (7), (8) приведены в [7,8]. Результаты расчетов типичных вариантов для железа, никеля и алюминия представле-

ны на рисунках 1-6. Варианты для железа (рис. 2, 5) и никеля (рис. 1, 4) отвечают знакопостоянной выпуклости функции $V(T)$ по обе стороны ФГ. Для алюминия выпуклость знакопеременная (рис 3, 6). Все рисунки размещены в столбцах, причем номер рисунка соответствует номеру варианта. На рисунках, отмеченных буквами а, б, в, г и д изображены, соответственно, $q_j(t)$, $T_j(t)$, $N(t)$, $q_w(t)$ и $T_w(t)$. Теплофизические параметры материалов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Теплофизические параметры материалов

	$c_{\rho 0}^*$, кгК/Дж	λ_0^* , Вт/мК	λ_1^* , Вт/мК ²	ρ^* , кг/м ³	$c_{\rho 0}^j$, кгК/Дж	λ_0^j , Вт/мК	λ_1^j , Вт/мК ²	ρ_j , кг/м ³	γ_j , с	γ^* , с
Fe	825	39	0,001	7040	762	35,0	0,001	7590	$4 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-5}$
Ni	735	69	0,001	7850	625	78,5	0,0055	8100	$1 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-5}$
Al	1176	98,1	0,037	2360	1255	217,7	-0,02	2550	$5 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-8}$

Масштабы величин зависят от материала и принимались: $T_b = T_c$; $c_b = c_0^j \cdot \rho_j$; $x_b = 1 \cdot 10^{-4}$ м; $t_b = 1 \cdot 10^{-5}$ с; $\lambda_b = \lambda_0^j$; $q_b = 1 \cdot 10^9$ Вт/м². (T_c – температура кристаллизации материала). Остальные входные параметры задачи представлены в таблице 2.

Таблица 2

	T_*	$T_0(0)$	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	k	n	x_w
Вар. 1	1,001	0,999	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	1,5	9,0	-0,01
Вар. 2	1,001	0,995	$0,5 \cdot 10^{-3}$	$0,5 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	2,0	1,0	-0,01
Вар. 3	1,01	0,999	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$0,5 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$0,5 \cdot 10^{-6}$	1,5	8,5	-0,01
Вар. 4	1,001	0,996	$1 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-3}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	2,0	1,0	-0,01
Вар. 5	1,001	0,999	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$	1,6	9,5	-0,01
Вар. 6	1,01	0,998	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$-5 \cdot 10^{-7}$	$-5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-7}$	2,0	8,0	-0,01

Расчеты были проведены с помощью отрезков рядов (7), (8), включающих члены разложений третьего порядка. Наблюдается хорошая практическая сходимость рядов. Различие в результатах расчета T , q с учетом членов 2-го и 3-го порядков по α , β не превышает 0,08 %.

Приведенная табличная и графическая информация дает возможность судить о воздействии на процесс таких важных параметров, как γ_j , γ^* , $T_0(0)$, T_* , k , n . Данные примеры демонстрируют многовариантный характер установления квазистационарного теплового режима за ФГ.

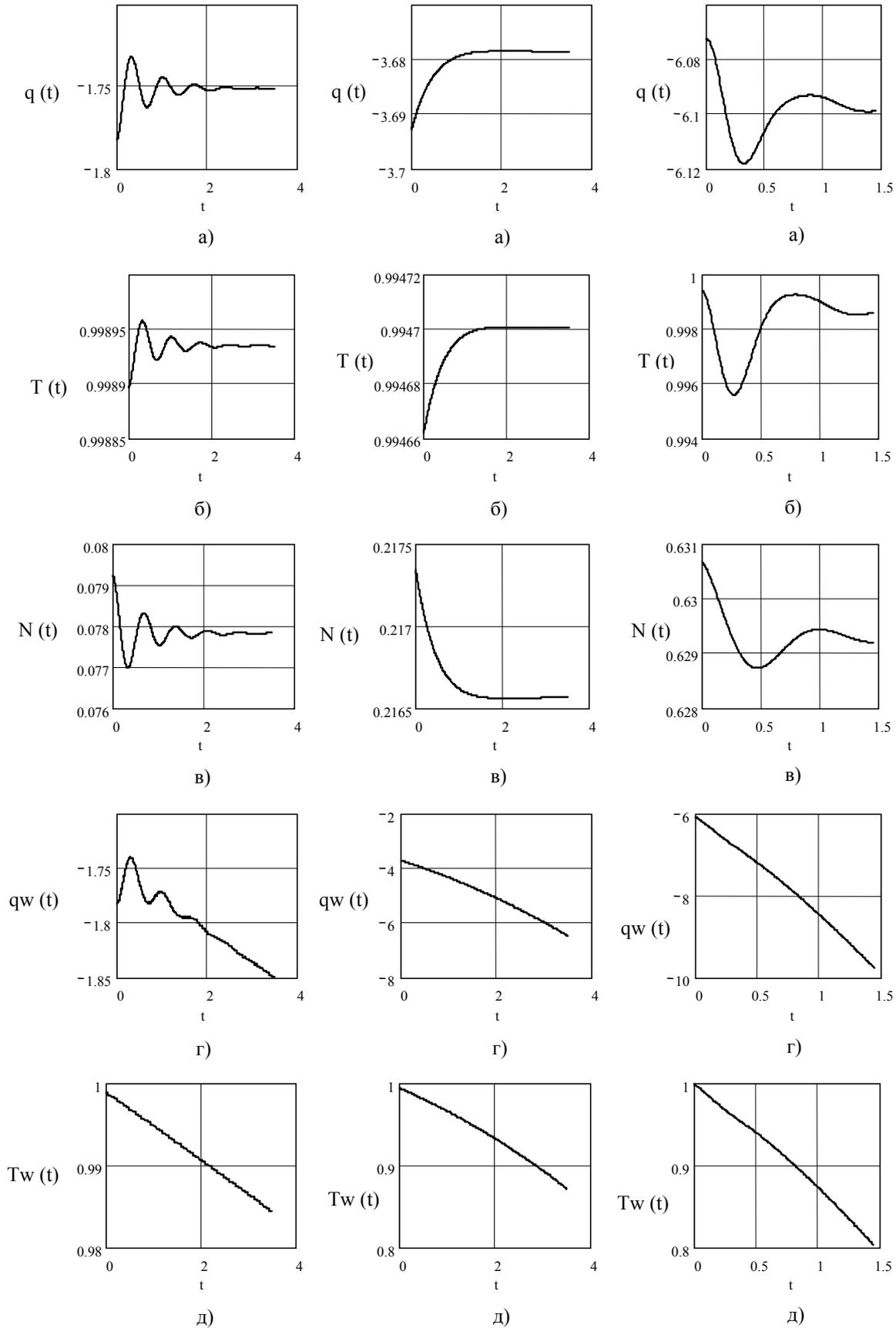


Рис. 1

Рис. 2

Рис. 3

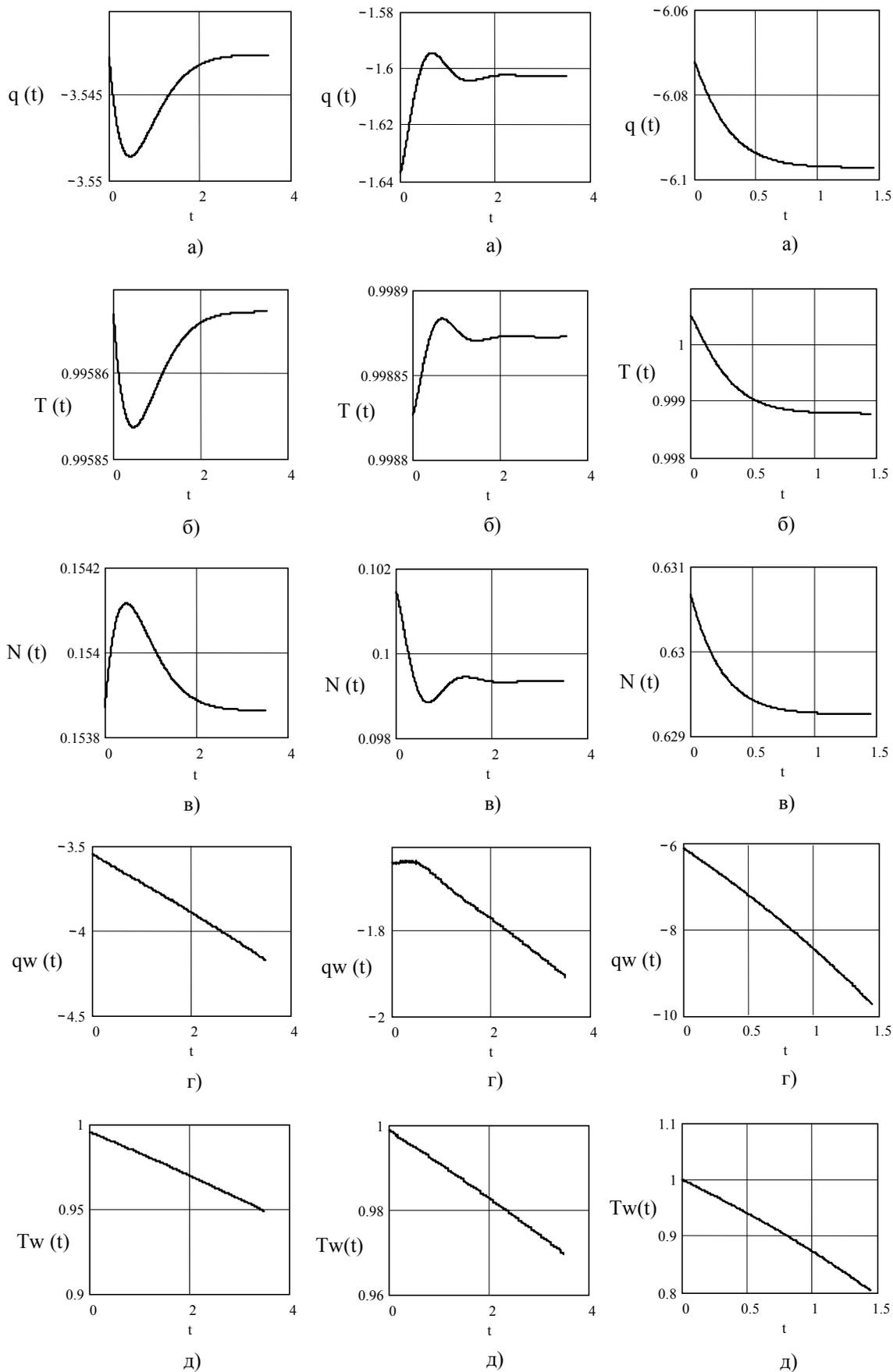


Рис. 4

Рис. 5

Рис. 6

Заключение. Представлены результаты численного моделирования тепловых процессов высокоскоростной кристаллизации для трех металлов: Fe, Ni, Al. Даны примеры, иллюстрирующие качественные и количественные свойства теплового поля за ФГ высокоскоростной кристаллизации. Учет нелинейных свойств среды позволяет получить содержательную физическую информацию об условии реализации процесса и его устойчивости, о колебательно-релаксационных свойствах ФГ.

Работа выполнена под научным руководством профессора Шабловского О.Н.

Литература

1. Полеся А.Ф., Гудзенко В.Н., Бродский В.М. Температурные условия кристаллизации алюминиевых сплавов при скоростях охлаждения 10^4 - 10^6 град/с. В кн. Рост и дефекты металлических кристаллов.- Киев: Наукова думка, 1972.- С. 421-427.
2. Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок. - Новосибирск: Наука, 1985.- С. 135.
3. Galenko P., Sobolev S. Local nonequilibrium effect on undercooling in rapid solidification of alloys //Physical Review E. 1997. Vol. 55. №1. P. 343-352.
4. Шабловский О.Н. Релаксационные тепловые структуры и фазовые границы в нелинейных средах //Труды 2-й Российской национальной конференции по теплообмену.- М.: МЭИ, 1998.- Т. 7: Теплопроводность, теплоизоляция.- С. 251-254.
5. Шабловский О.Н. Некоторые задачи нелинейной динамики локально-неравновесных тепловых полей //Первый междисциплинарный семинар «Фракталы и прикладная синергетика»: Сб. тезисов.- М.: Изд-во РАН, 1999.- С. 54-56.
6. Shablovsky O.N. Non-linear thermal processes of high-speed crystallization. //Single crystal growth, strength problems and heat mass transfer. Third Intern. Conference. Russia, Obninsk. 1999. P. 240-241.
7. Шабловский О.Н., Кроль Д.Г. Эволюционные свойства фазовой границы высокоскоростной кристаллизации //Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности: Сб. науч. тр. - СПб.: Санкт-Петербургское отделение МАН ВШ, 2000. - С. 198-201.
8. Шабловский О.Н., Кроль Д. Г. Затухающий апериодический режим на фазовой границе высокоскоростной кристаллизации //Материалы МНТК «Современные проблемы машиноведения».- Гомель: ГГТУ им. П.О. Сухого, 2000. - С. 82-85.

Получено 29.09.2000 г.