

ТРЕХМЕРНЫЕ СВОЙСТВА ТЕПЛОвого ПОТОКА НА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

В. А. Климович

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

Научный руководитель И. А. Концевой

Процессы высокоскоростной кристаллизации глубоко переохлажденного расплава служат основой перспективных способов получения материалов с новыми функциональными свойствами. В настоящее время в экспериментальных условиях достигнута скорости роста 20–70 м/с при глубине переохлаждения расплава до 300 К. В данной работе рассматривается рост кристалла из однокомпонентного переохлажденного расплава с позиций теории локально-неравновесного теплопереноса. В общей постановке трехмерная нестационарная задача очень сложна. Здесь мы применяем более простой (полуобратный) подход к проблеме, позволяющий выяснить многие существенные детали процесса формирования теплового поля на поверхности роста кристалла, а именно: рассматриваем фазовую границу стационарной геометрической формы, перемещающуюся с постоянной скоростью. Этот случай характерен для стадии установившегося во времени режима роста.

Релаксационная модель Максвелла переноса тепла в неподвижной среде состоит из уравнения для теплового потока и уравнения баланса энергии:

$$\mathbf{q} + \gamma \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -\lambda \text{grad} T; \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \text{div} \mathbf{q} = q_v; \quad du(T)/dt = c,$$

где T – температура; $\mathbf{q}(q_1, q_2, q_3)$ – вектор удельного теплового потока; λ – коэффициент теплопроводности; c – объемная теплоемкость; γ – время релаксации теплового потока; q_v – мощность внутренних источников энергии; u – плотность энергии. В трехмерном пространстве (x, y, z) фазовую границу (ФГ) кристаллизации моделируем поверхностью сильного разрыва теплового поля. На поверхности сильного разрыва $f(x, y, z, t) = 0$ условия динамической совместности получаем обычным образом:

$$N(u_j - u_*) - Q = (\mathbf{qn})_j = (\mathbf{qn})_*; \quad (\mathbf{qs})_j = (\mathbf{qs})_*; \quad (\mathbf{qb})_j = (\mathbf{qb})_*; \quad (1)$$

$$N = -\frac{\partial f / \partial t}{|\text{grad}f|}; \quad Q = L \left(N + \gamma_j \frac{dN}{dt} \right).$$

где (1) – баланс энергии на ФГ и условия непрерывности касательных и бинормальных к ФГ компонент вектора теплового потока; L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; $\mathbf{N} = N\mathbf{n}$ – скорость перемещения ФГ. Звездочкой отмечены параметры расплава; индекс j указывает, что значение функции определено на правой стороне разрыва, в твердой фазе. Подробности вывода и обсуждение соотношений (1) даны в [1]. Отметим, что при записи формул (1) используется ортогональный базис $\mathbf{s}, \mathbf{n}, \mathbf{b}$, соответствующий касательной, главной нормали и бинормали к поверхности ФГ.

Следуя работе [2], обсудим вопрос о влиянии морфологических свойств поверхности роста на характер распределения теплового потока $\mathbf{q}_* = \mathbf{q}_*^{(s)} + \mathbf{q}_*^{(n)}$, поступающего из жидкой к твердой фазе. Для касательной и нормальной компонент имеем формулы:

$$\mathbf{q}_*^{(s)} = \mathbf{q}_* \cos \beta_*; \quad \mathbf{q}_*^{(n)} = \mathbf{q}_* \sin \beta_*,$$

см. формулы (1). Пусть поверхность ФГ имеет вид $f(x, y, z, t = t_0) = 0$, $t_0 \geq 0$, тогда, запишем:

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

Рассмотрим характерные примеры поверхности роста. Расчеты проведены в безразмерных переменных и представлены на рис. 1–3.

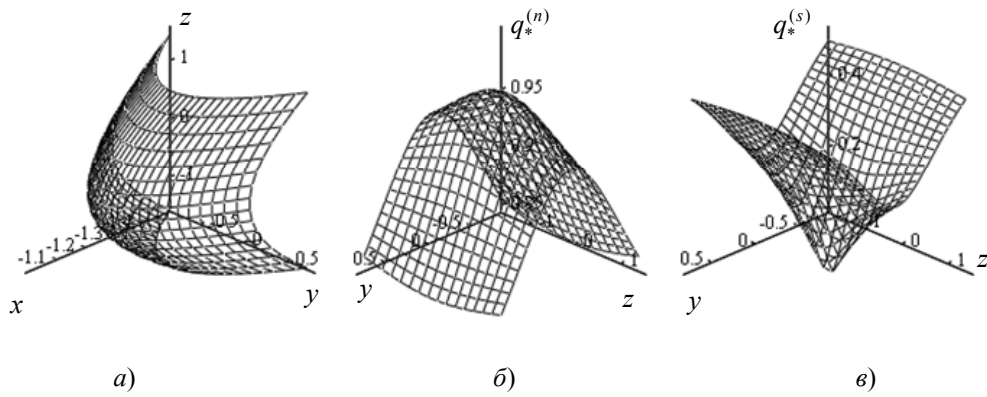


Рис. 1. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока \mathbf{q}_* .

Двуполостный гиперболоид: $A_1 = 1$; $A_2 = 1$; $A_3 = 2$

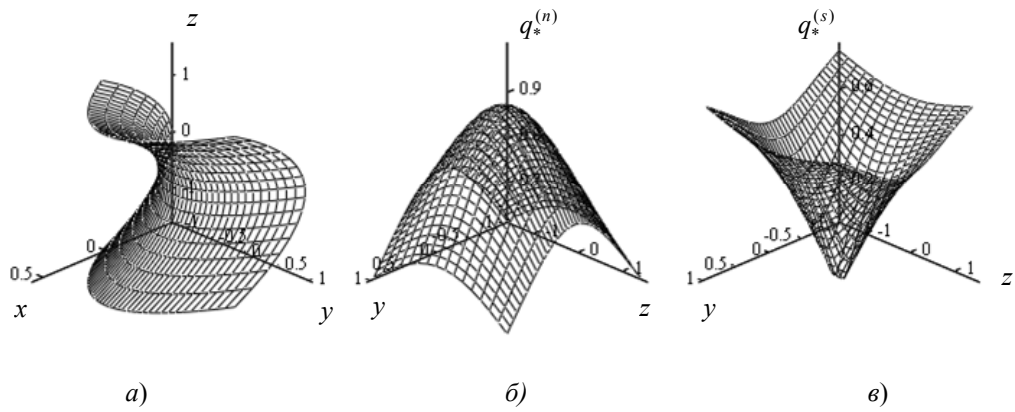


Рис. 2. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока \mathbf{q}_* .

Гиперболический параболоид: $A_1 = 1$; $A_2 = 1$; $A_3 = 2$

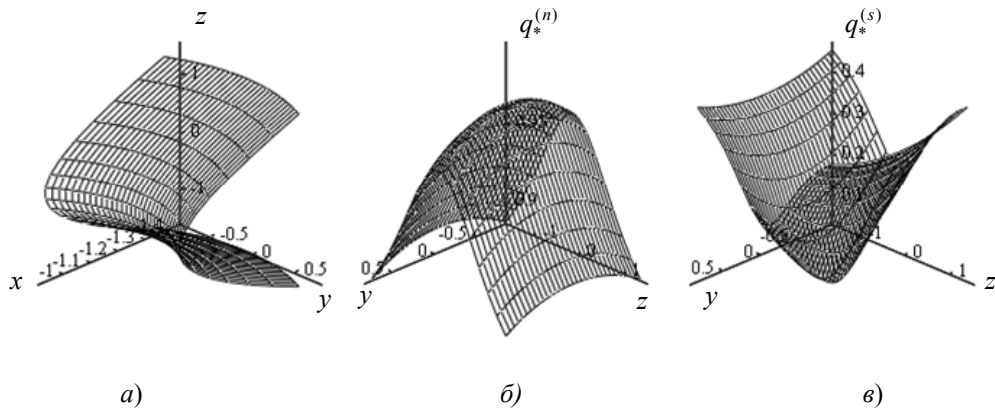


Рис. 3. Влияние заострения вершины дендрита на распределение нормальной и касательной компонент теплового потока \mathbf{q}_* .

Однополостный гиперболоид: $A_1 = 1$; $A_2 = 1$; $A_3 = 1,5$

Пример 1. В качестве выпуклой поверхности возьмем двуполостный гиперболоид:

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

Здесь мы работаем с одной из двух разобщенных полостей. Для сравнения приведем пример расчета для ФГ, имеющей вогнутость. Такой случай относится к стадии втягивания внутрь вершины дендрита, т. е. это состояние поверхности роста, предшествующее расщеплению вершины. Подробности, относящиеся к изменению отсчета углов β_* , β_j очевидны и здесь не приводятся.

Пример 2. Гиперболический параболоид:

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

Пример 3. Однополостный гиперболоид:

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

В этом случае расчеты проведены для части поверхности, показанной на рис. 3, а.

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 рассмотренных примеров.

Работа выполнена в рамках госпрограммы «Энергетические системы, процессы и технологии». Научный руководитель проекта – профессор О. Н. Шабловский.

Литература

1. Шабловский, О. Н. Тепловая градиентная катастрофа и рост двумерного свободного дендрита в переохлажденном расплаве / О. Н. Шабловский // Прикладная физика. – 2007. – № 3. – С. 29–37.
2. Шабловский, О. Н. Локально-неравновесные свойства фазовой границы высокоскоростной кристаллизации переохлажденного расплава. Ч. 2. Формирование теплового потока на поверхности дендрита / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль, И. А. Концевой // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2017. – № 4. – С. 75–83.
3. Шабловский, О. Н. Эволюция и неустойчивость линии роста дендрита в переохлажденном расплаве / О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль, И. А. Концевой // Ученые зап. Забайкал. гос. ун-та. Физика. Математика. Техника. Технология. – 2018. – Т. 13, № 4. – С. 56–68.