

ею задачей (условие ограниченности решения внутри капли опускается):

$$(5.3) \quad J(\psi) \frac{\partial c_2}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \psi} \Gamma(\psi) \frac{\partial c_2}{\partial \psi}; \quad \tau = 0, \quad c_2 = 0; \quad \psi = 0, \quad c_2 = f(1),$$

$$\Gamma(\psi) = \oint \frac{\sqrt{g}}{g_{\psi\psi}} d\chi, \quad J(\psi) = \oint \sqrt{g} d\chi, \quad g = g_{\psi\psi} g_{\chi\chi} g_{\varphi\varphi}.$$

Здесь ψ, χ, φ — ортогональная система координат, связанная с функцией тока $\psi = \psi^{(2)}$, определяющей течение внутри капли; ортогональная к ψ криволинейная координата χ находится путем решения уравнения $(\nabla\psi \cdot \nabla\chi) = 0$ (в плоском случае следует положить $g_{\varphi\varphi} = 1$, а в осесимметричном $g_{\varphi\varphi} = r^2 \sin^2 \theta$). В тех случаях, когда внутри капли имеется несколько независимых областей Ω_j ($j = 1, \dots, n$) с полностью замкнутыми линиями тока, ограниченных особыми (критическими) линиями или поверхностями тока (которые замыкаются на поверхности капли), уравнение (5.3) следует записывать и решать независимо во всех областях Ω_j , учитывая то, что при $\tau \geq O(1)$ на особые линии тока с поверхности капли «носится» то же самое значение концентрации, равное $f(1)$ (в [7] приведен пример такого течения при $j = 4$).

Поступила 3 I 1983

ЛИТЕРАТУРА

1. Воротилин В. П., Крылов В. С., Левич В. Г. К теории экстракции из падающей капли. — ПММ, 1965, т. 29, вып. 2.
2. Левич В. Г., Крылов В. С., Воротилин В. П. К теории экстракции из падающей капли. — ДАН СССР, 1965, т. 160, № 6.
3. Левич В. Г., Крылов В. С., Воротилин В. П. К теории нестационарной диффузии из движущейся капли. — ДАН СССР, 1965, т. 161, № 3.
4. Ruckenstein E. Mass transfer between a single drop and a continuous phase. — Int. J. Heat Mass Transfer, 1966, vol. 10, N 12.
5. Winnicow S. The heat and mass transfer from a fluid sphere at large Reynolds and Peclet number. — Can. J. Chem. Engng, 1968, vol. 46, N 4.
6. Chao V. T. Transient heat and mass transfer to translating droplet. — Trans. ASME. Ser. C. J. Heat Transfer, 1969, vol. 91, N 2.
7. Morrison F. A. (Jr.) Transient heat and mass transfer to a drop in electric field. — Trans. ASME. Ser. C. J. Heat Transfer, 1977, vol. 99, N 2.
8. Броунштейн Б. П., Фишбейн Г. А. Гидродинамика, массо- и теплообмен в дисперсных системах. Л.: Химия, 1977.
9. Броунштейн Б. П., Железняк А. С. Определение частных коэффициентов массопередачи в системах с переменным коэффициентом распределения. — ДАН СССР, 1963, т. 153, № 4.
10. Гупало Ю. П., Полянин А. Д., Рязанцев Ю. С. Массоперенос в диффузионном следе капли при стоксовом обтекании. — ПММ, 1977, т. 41, вып. 2.
11. Полянин А. Д. О диффузионном взаимодействии капель в жидкости. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1978, № 2.
12. Коул Дж. Методы возмущений в прикладной математике. М.: Мир, 1972.
13. Найфэ А. Методы возмущений. М.: Мир, 1976.
14. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования. М.: Наука, 1971.
15. Kronig R., Brink J. C. On the theory of extraction from falling droplets. — Appl. Scient. Res., 1950, vol. A2, N 2.

УДК 532.785.536.421,548.5.01

О РАСЧЕТЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЛАВКИ

Ю. В. Апанович

(Рига)

Одним из недостатков работ, посвященных исследованию численными методами процессов тепло-массопереноса при росте кристаллов (см., например, [1, 2]), является то, что температура плавления предполагается не зависящей от состава фаз. Таким образом, при изучении затвердевания бинарных сплавов использовалась модель кристаллизации однокомпонентного расплава. В то же время построение моделей выращи-

вания технологически важных кристаллических материалов требует учета всех основных процессов тепломассопереноса, определения влияния на кривизну границы раздела фаз неоднородности распределения состава в жидкой фазе (см., например, [3]).

Цель данной работы — построение методики решения термодиффузионной задачи затвердевания двухкомпонентного расплава в условиях, когда не образуется двухфазная зона. Методика излагается в применении к осесимметричной задаче зонной плавки РbTe, которая имеет стационарное решение, позволяющее использовать для его получения метод установления.

На примере этой задачи изучается влияние естественной конвекции на форму зоны и распределение температуры и концентрации компонентов в расплаве при различных величинах ускорения силы тяжести.

Уравнение теплопроводности для температуры, нормированной на максимальную температуру на боковой поверхности ампулы $T_m = 1073$ К, решается в жидкой и твердой фазах, а уравнение Навье — Стокса в переменных функция тока ψ — функция вихря ω и уравнение диффузии для концентрации теллура рассматриваются лишь в жидкой фазе (твердая фаза имеет стехиометрический состав РbTe). Отношение коэффициентов теплопроводности твердой и жидкой фаз задавалось равным $\lambda_s/\lambda_l = 0,203$, удельных теплоемкостей $c_s/c_l = 0,357$, плотностей $\rho_s/\rho_l = 1$.

1. В системе отсчета, связанной с нагревателем, движущимся со скоростью $V = 0,55 \cdot 10^{-7}$ м/с вдоль оси z , в цилиндрической системе координат (r, z) ($r \in [0, 1]$, $z \in [-L, L]$) с учетом осевой симметрии уравнения имеют вид

$$(1.1) \quad \rho_k c_k \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_k c_k (\mathbf{v} \nabla) T = \frac{4}{\text{Pr}} \text{div} (\lambda_k \text{grad } T) \quad k = s, l;$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + \text{div} (c \mathbf{v}) = \frac{1}{\text{Sc}} \text{div grad } c;$$

$$(1.3) \quad \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial (u \omega)}{\partial r} + \frac{\partial (v - V) \omega}{\partial z} = \Delta \omega + \text{Cr} (\mathbf{g} \times \text{grad } T);$$

$$(1.4) \quad \Delta \psi = -\omega;$$

$$(1.5) \quad u = -\frac{\partial \psi}{\partial z};$$

$$(1.6) \quad v = \frac{1}{r} \frac{\partial (r \psi)}{\partial r}.$$

В твердой фазе вектор $\mathbf{v} = (0, -V)$, в жидкой $\mathbf{v} = (u, v - V)$, u, v — проекции вектора скорости течения расплава соответственно на оси r и z , оператор Δ — лапласиан векторной функции, \mathbf{g} — единичный вектор, параллельный вектору ускорения свободного падения.

Характерные числа Прандтля, Шмидта и Грасгофа выбирались равными $\text{Pr} = \nu \rho_l c_l / \lambda_l = 0,025$, $\text{Sc} = \nu / D = 13$, $\text{Gr} = \beta g R^3 T_m \nu^{-2}$, $0 \leq \text{Gr} \leq 1,86 \cdot 10^6$.

Задача (1.1) — (1.6) решена со следующими граничными условиями: 1) на оси симметрии Γ_1 (фиг. 1)

$$\partial T / \partial r = 0, \quad \partial c / \partial r = 0, \quad \psi = 0, \quad \omega = 0;$$

2) на боковой поверхности ампулы Γ_2

$$\partial c / \partial r = 0, \quad \psi = 0, \quad \partial \psi / \partial r = 0, \quad T = 1 - \gamma |z|,$$

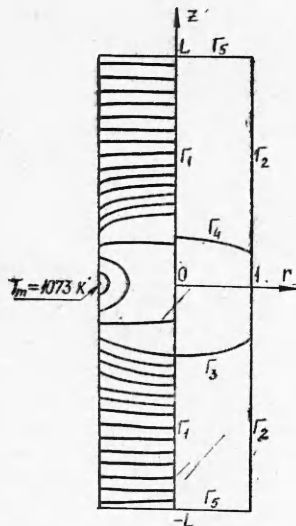
$$\text{здесь } \gamma = \begin{cases} RG/T_m, & z < 0, \\ -RG/T_m, & z > 0, \end{cases} \quad G = 80 \text{ К/см};$$

3) на межфазных поверхностях Γ_3 и Γ_4 , заданных уравнениями $z_1 = z_1(r)$, $z_2 = z_2(r)$, реализуются условия сохранения массы компонентов и энергии:

$$(1.7) \quad \partial c / \partial n = -(1 - m) \text{Sc} (V + v_i)_n c, \quad v_{in} = k(c - c_{li}) - V_n,$$

$$\lambda_s \partial T / \partial n - \partial T / \partial n = \text{St} (V + v_i)_n, \quad i = 1, 2, \quad 0 \leq r \leq 1, \quad z = z_i(r),$$

$$\psi = 0, \quad \partial \psi / \partial n = 0,$$



Фиг. 1

где безразмерный параметр $St = \rho_i \kappa v / T_m \lambda_i$; κ — удельная теплота кристаллизации; m — коэффициент распределения; v_i — скорость движения границы раздела фаз в системе отсчета, связанной с нагревателем; c_{ii} — равновесная концентрация, определяемая равновесной фазовой диаграммой $c = \varphi(T)$. Величины с индексом n означают проекции соответствующих им векторов на внутреннюю нормаль к Γ_3, Γ_4 ;

4) на Γ_5 условия ставятся только для (1.1) и имеют вид

$$\partial T / \partial z = \gamma \text{ при } r \in [0, 1], z = -L \text{ и}$$

$$\partial T / \partial z = -\gamma \text{ при } r \in [0, 1], z = L.$$

Таким образом, основным отличием предложенной постановки задачи является использование кинетического условия (1.7) вместо задания равновесной фазовой диаграммы на фронте кристаллизации $c_i = c_{ii} = \varphi(T)$, $r \in [0, 1]$, $z_i = z_i(r)$, $i = 1, 2$. Это позволяет, применяя итерационный метод установления, моделировать движение границы раздела фаз.

Условие (1.7) дает возможность исследовать нестационарные и кинетические режимы роста, используя кинетические фазовые диаграммы в (1.7) для получения m . Решение задач, близких к равновесию, получается как предел решения неравновесных при малых скоростях роста ($k \rightarrow \infty$ и $c \rightarrow c_i$ на межфазной границе).

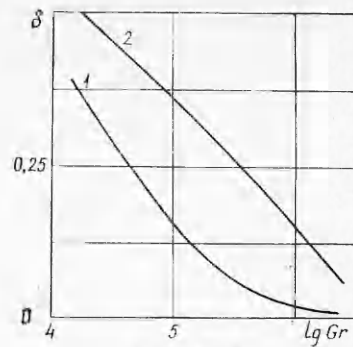
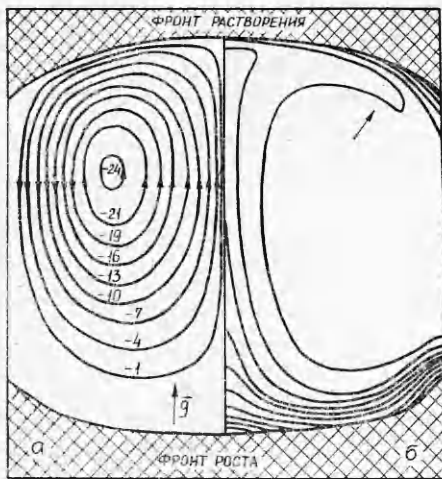
Начальные условия для задачи (1.1) — (1.6) задавались следующим образом: $T(r, z) = 1 - \gamma|z|$, $\psi = 0$, $\omega = 0$, $c = \text{const}$, $z_1 = z_1^0$, $z_2 = z_2^0$.

2. Методика решения. Решение уравнений (1.2) — (1.6) осложнено тем, что область, занимаемая жидкой фазой, меняет форму. Поэтому целесообразно уравнения, определенные в расплавленной зоне, решать на разностных сетках, перестраивающихся по форме расплавленной зоны.

Это дает возможность использовать относительно крупные сетки для уравнения (1.1) в обеих фазах и мелкие для (1.2) — (1.6) в жидкой фазе, сгущая их в областях с большими градиентами или особенностями. Уравнение (1.1) решается по методике [4] с введением области выделения скрытой теплоты кристаллизации шириной 4–6 узлов разностной сетки. Разностные схемы для (1.2) — (1.6) получаются с помощью разностных операторов div , grad и Δ , определенных в [5]. Они приводят к консервативной разностной схеме на 9-точечном шаблоне. Использовались неявные схемы, и переход на $n + 1$ временной слой осуществлялся итерационно.

Последовательность решения системы уравнений предлагается следующей: а) по известным на n слое T^n , v^n , z_1^n , z_2^n находится T^{n+1} ; б) с использованием z_1^n , z_2^n , $v_{1n} = k(c^n - c_{i1}^n) - V_n$, $v_{2n} = k(c^n - c_{i2}^n) - V_n$ определяются z_1^{n+1} , z_2^{n+1} ; в) по z_1^{n+1} , z_2^{n+1} перестраивается разностная сетка; г) рассчитываются c^{n+1} , ω^{n+1} , ψ^{n+1} , v^{n+1} ; д) по величинам z_1^{n+1} , z_2^{n+1} , T^{n+1} с помощью интерполяции рассчитывается температура $T_i^{n+1}(r)$ ($i = 1, 2$) на границе раздела фаз $z_i^{n+1} = z_i^{n+1}(r)$; е) с использованием $T_i^{n+1}(r)$ вычисляются равновесные концентрации $c_{ii}^{n+1}(r)$ и $m_{ii}^{n+1}(r)$. В случае использования грубых начальных приближений и в кинетических режимах роста следует использовать кинетическую фазовую диаграмму и проводить итерации по этапам «а» — «е».

Значение коэффициента k выбиралось в пределах от 10 до 50. Расчеты показали, что изменение k в этих пределах слабо сказывалось на решении данной задачи, и, следовательно, в случае расчета диффузионных режимов роста задание $k > 50$ нецелесообразно, так как оно приводит к необходи-



Ф и г. 3

Ф и г. 2

мости итерирования этапов «а» — «е» и к существенному увеличению машинного времени счета.

3. Влияние естественной конвекции. По предложенной методике получено решение осесимметричной термодиффузионной задачи зонной плавки РbТе.

В отсутствие естественной конвекции в объеме расплава массоперенос обеспечивается диффузией и распределение концентрации таково, что ее градиент практически постоянен в объеме расплава. Жидкая зона смещена в сторону против движения нагревателя. Координаты фронтов z_1 и z_2 при $r = 0$ соответственно 0,92, 0,55, а кривизна $\Delta z_1 = z_1(0) - z_1(1) = -0,27$, $\Delta z_2 = z_2(0) - z_2(1) = 0,18$. Границы раздела фаз выпуклые в сторону твердой фазы. Изотермы для этого случая с шагом 10,7К приведены на фиг. 1. Отклонение фронтов от изотерм мало и заметно лишь вблизи стенок ампулы.

При $Gr = 1,86 \cdot 10^4 - 1,86 \cdot 10^6$ (условиям на Земле соответствует $Gr = 1,86 \cdot 10^6$) распределение температуры слабо отличается от представленного на фиг. 1, так как число $Pr \ll 1$ и в расплаве реализуется одновихревое конвективное течение, линии тока которого при $Gr = 1,86 \cdot 10^6$ приведены на фиг. 2, а. Максимальное значение скорости в расплаве при этом $0,35 \cdot 10^{-2}$ м/с.

Конвекция интенсивно перемешивает расплав, приводя при $Gr = 1,86 \cdot 10^6$ к распределению концентрации Те, представленному линиями постоянной концентрации с шагом 10^{-4} на фиг. 2, б. В центре расплавленной зоны образуется область перемешивания, занимающая практически весь объем расплава, а вблизи межфазных границ формируются тонкие диффузионные пограничные слои.

Поскольку вихрь смещен к фронту растворения, скорости течения вблизи фронта растворения выше, нежели у фронта роста. Это приводит к выносу расплава с несколько меньшим содержанием Те от оси зоны к стенке ампулы (показан стрелкой на фиг. 2, б). Кривизна фронта роста при $Gr = 1,86 \cdot 10^5$ становится равной $-0,26$, а фронта растворения $+0,26$. На фиг. 3 представлена зависимость толщины диффузионных пограничных слоев δ от $\lg(Gr)$ при $0 \leq Gr \leq 1,86 \cdot 10^6$ (толщина диффузионного пограничного слоя определяется как расстояние от межфазной границы до точки, градиент концентрации в которой равен среднему градиенту по длине зоны в этой точке). Кривая 1 представляет зависимость $\delta(\lg Gr)$ вблизи фронта растворения, а 2 — у фронта роста при $r = 0,5$.

Увеличение скорости движения нагревателя в отсутствие конвекции приводит к смещению зоны относительно максимума температуры вплоть до срыва процесса. Результаты расчетов подтверждают выводы, полу-

ченные из анализа одномерной задачи в [6], и показывают, что естественная конвекция, увеличивая эффективный коэффициент диффузии, уменьшает смещение зоны, и, таким образом, делает процесс более устойчивым, что позволяет повысить скорость движения нагревателя.

Автор выражает благодарность Т. А. Черепановой, под руководством которой была выполнена эта работа.

Поступила 26 V 1983

ЛИТЕРАТУРА

1. Clark P. A., Wilcox W. R. Influence of gravity on thermocapillary convection in floating zone melting of silicon.— J. Cryst. Growth, 1980, vol. 50, N 2.
2. Nikitin S. A., Polezhaev V. I., Fedyushin A. I. Mathematical simulation of impurity distribution in crystals prepared under microgravity conditions.— In: Crystal Growth 1980: Proc. 6th Inter. Conf. of Crystal Growth. Amsterdam: North-Holland, 1981.
3. Cherepanova T. A., Иjukhin V. V., Cherepanov V. Y. Influence of gravitation in the processes of heat and mass transfer in solution crystal growth by the travelling heater method (THM). II.— Crystal Res. and Techn., 1982, vol. 17, N 7.
4. Самарский А. А., Тишкин В. Ф. и др. Использование метода опорных операторов для построения разностных аналогов операций тензорного анализа.— Дифференциальные уравнения, 1982, т. 18, № 7.
5. Самарский А. А., Мейсенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана.— ЖВМФ, 1965, т. 5, № 5.
6. Cherepanova T. A., Aronovich Y. V. Influence of gravitation on the processes of heat and mass transfer in solution crystal growth by the travelling heater method (THM). III.— Crystal Res. and Techn., 1983, vol. 18, N 3.

УДК 532.135 + 539.67

О ПАРАМЕТРАХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО РЕЛАКСАЦИОННОГО СПЕКТРА В МЕТАЛЛЕ

С. И. МЕШКОВ, А. С. ПОДКОПАЕВ

(Москва, Куйбышев)

1. Монотонное возрастание релаксационного внутреннего трения с увеличением температуры или уменьшением частоты колебаний принято называть фоном.

В рамках одномерной линейной теории вязкоупругости для ядер последействия Абея и А. Р. Ржаницына, а также любых ядер Ю. Н. Работнова предположение о полной релаксации модуля упругости приводит к следующей зависимости фона внутреннего трения от частоты:

$$(1.1) \quad \operatorname{tg} \delta = \sin \psi / ((\omega\tau)^\gamma + \cos \psi), \quad \psi = \pi\gamma/2, \quad 0 < \gamma \leq 1,$$

где $\operatorname{tg} \delta$ — тангенс угла потерь; ω — циклическая частота колебаний; τ — время релаксации; γ — параметр дробности, характеризующий размытие релаксационного спектра [1]. Кроме того, если использовать ядро последействия Абея и соответствующее резольвентное ядро релаксации Ю. Н. Работнова, то частотную зависимость фона можно описать без предположения о полной релаксации модуля сдвига. Тогда для внутреннего трения получается формула [2]

$$(1.2) \quad \operatorname{tg} \delta = \sin \psi / (v^{-1}(\omega\tau)^\gamma + \cos \psi), \quad v = (\mu_u - \mu_r) / \mu_u.$$

Здесь μ_u и μ_r — нерелаксированное и релаксированное значения модуля сдвига.

Наряду с методами, в которых к образцу прикладываются сдвиговые динамические нагрузки, в экспериментальной практике широко распространены методы продольных и изгибных колебаний, в которых образец испытывает деформации растяжения — сжатия. Запишем выражение для внутреннего трения в этом случае.

Пусть комплексный модуль сдвига μ^* описывается обобщенной моделью Максвелла

$$(1.3) \quad \mu^* = \mu_u (i\omega\tau)^\gamma / (1 + (i\omega\tau)^\gamma).$$

Комплексный модуль Юнга E^* выражается через модули сдвига μ^* и всестороннего сжатия K , релаксацию которого обычно считают пренебрежимо малой:

$$(1.4) \quad 1/E^* = 1/3\mu^* + 1/9K.$$