

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ**

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

А.И. ФЕДЮШКИН

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ И
ТЕПЛОМАССОБМЕНА ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ КРИСТАЛЛОВ С
УЧЕТОМ ПРИКРИСТАЛЛИЗАЦИОННОЙ (MUSHY) ЗОНЫ БЕЗ И
С ВИБРАЦИОННЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ НА РАСПЛАВ
Обзор**

Препринт № 1074

Москва 2014

УДК 532.252+536.248.2

А.И. Федюшкин

Моделирование гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов с учетом прикристаллизационной (mushy) зоны без и с вибрационным воздействием на расплав. Обзор. - Препринт ИПМех РАН, № 1074, Москва, 2014, 35 с.

Аннотация

В препринте приводится обзор работ относящихся к исследованию процессов затвердевания с учетом тонкой зоны (mushy region), где происходит переход от жидкого к твердому состоянию вещества. Описаны математические модели для конвективного течения расплава с учетом mushy зоны. В работе приводятся результаты численного решения двух модельных задач по направленной кристаллизации с учетом mushy зоны для разных параметров с и без вибрационного воздействия на расплав.

Данная работа была поддержана российским фондом фундаментальных исследований, грант №. 13-02-12199

Abstract

This paper presents a review of the papers related to the study of solidification processes taking into account of a thin zone (mushy region), where the transition from liquid to solid state of matter. Described a mathematical model for convective melt flow taking into account of the mushy zone. The paper presents the results of numerical solutions of two simple problems by directional crystallization for different parameters of the mushy zone with and without vibration effect on the melt.

The research was supported by the Russian Foundation of Basic Research. Grant No. 13-02-12199

ISBN 978-5-91741-114-9

055(02)2 © Федеральное государственное бюджетное учреждение

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской Академии Наук, 2014

Содержание

1.	Введение	4
2.	Математическое моделирование	9
3.	Результаты расчетов	15
3.1.	Влияние определяющих безразмерных параметров на гидродинамику и теплообмен в расплаве при направленной кристаллизации	16
3.2.	Конвективный теплообмен при кристаллизации теллурида кадмия CdTe вертикальным методом Бриджмена с вибрационным воздействием на расплав	22
	Литература	28

1. Введение

В процессах получения материалов из расплавов с фазовым переходом около фронта кристаллизации со стороны расплава может существовать узкая зона, где физические свойства материала могут отличаться от свойств жидкого расплава и твердого кристалла. Расплав при направленной кристаллизации переходит из жидкого состояния в твердое, то есть происходит фазовый переход согласно диаграмме состояния. При фазовом переходе изменяются свойства материала от свойств расплава до свойств кристалла, и этот процесс во времени и в пространстве происходит не мгновенно, а изменения теплофизических, химических, структурных и реологических свойств происходят в узкой зоне расплава, расположенной около фронта кристаллизации. Такие изменения свойств расплавов известны давно в металлургии и работы по исследованию переходной зоны известны уже более полувека и в основном относятся к процессам литья металлов, получения сплавов, сварки и геодинамики [1-8]. Во многих работах, посвященных исследованию процессов гидродинамики и теплообмена при получении материалов из расплавов, указывается на наличие переходной фазы в расплаве около фронта кристаллизации и эту переходную зону или прикристаллизационный пограничный слой в литературе называют “Mushy Region” (MR), “Mushy Zone” (MZ) или “Mushy Layer” (ML), где могут одновременно присутствовать: расплав, подвижные и неподвижные образования твердого материала (в том числе первичной и вторичной дендритной морфологии), а также не твердый материал с отличными от расплава свойствами, то есть в MZ может присутствовать материал, который еще не твердый, но уже и не жидкий [5,6,9-14]. Подробный обзор работ по исследованию теплообмена в MZ, образования макро- и микро сегрегаций и дефектов при производстве легированных сталей приведен в работах [5,15], а также в диссертационной работе [16], посвященной численному моделированию теплопереноса при вертикальной кристаллизации сплава Pb-Sn. Образование MZ наблюдается также при сварке различных материалов, исследования теплопереноса при сварке начаты в работе [17] опубликованы в монографии [18] и были перенесены автором на процессы получения полупроводников различными методами, что отражено в нескольких патентах. В

работе [7] проведено моделирование ламинарного и турбулентного режима течения расплава показано влияние турбулентности на MZ.

Для различных составов расплавов и условий затвердевания зоны (MZ) могут различаться по содержанию жидких, твердых и «не жидких» фракций. В общем случае, содержание MZ может отличаться от основного расплава не только скоростями (неподвижные или подвижные) и теплофизическими свойствами, а и масштабами и морфологией образований (дендритно-подобные, столбчатые) и их распределением в MZ (гомогенное, неравномерное, дисперсное) [6, 11, 14]. Размеры структур и образований в MZ могут изменяться в широком диапазоне от 10^{-9} м до 10^{-2} м [11,14] и их условно можно разделить на структуры с макро- и с микро-масштабами. На микромасштабном уровне происходит зарождение дендритных и эвтектических структур в сплавах, которые могут достигать макроскопических размеров и влиять на образование микроструктур, то есть кинетики образования микро и макроструктур взаимосвязаны. Поэтому разделение процесса по макро- и микро-масштабам является условным. Рассмотрение формирования структур на микро-уровне – это не входит в рамки данного обзора, можно только указать подробный обзор по направленной кристаллизации оксидных эвтектик и формированию микроструктур дан в работе [19]. В ряде работ, например, в [14,20-26] предложены различные модели для описания формирования из растворов и расплавов эвтектических, дендритных структур и механизма образования микро- и макросегрегаций, то есть в этих работах предложены модели, связывающие микро- и макромасштабные процессы. Следует отметить, что все эти модели основаны на решении линейных уравнений теплопроводности и диффузии в безконвективном приближении и для описания зарождения микроструктур для этих моделей необходимо знать скорость кристаллизации, которая может быть определена из макромоделей. Например, в работе [25] представлена полуаналитическая модель для описания микросегрегации в MZ в бинарных сплавах и рост вторичных дендритных образований. В [26] представлена модель для одновременного описания микро- и макроструктур, только эта модель имеет недостаток в том, что для ее исходных данных для построения подсетки необходима информация о морфологии микроструктур для чего требуется сочетать данную модель с макромоделями по переносу тепла и массы, что может быть осуществлено в

будущем. В работах [23,24] говорится, что основным условием образования эвтектических структур является неравновесность процесса кристаллизации с концентрационным переохлаждением и показано, что скорость кристаллизации является единственным определяющим фактором образования столбчатых или пластинчатых эвтектических структур, их форм и углов наклона. Известно, что скорость течения расплава, в частности в MZ, существенным образом влияет на скорость кристаллизации, а как известно, последняя определяется из решения задачи с фазовым переходом - задачи Стефана [27, 28]. Поэтому в дальнейшем может быть хорошая перспектива для замыкания задачи о связи микро- и макромасштабных процессов при получении эвтектик, если для замыкания необходимо в теории [27,28]. В этом случае необходимо для моделей [27,28] скорость кристаллизации получать из численных расчетов гидродинамических моделей, то есть это такая же проблема, как и для замыкания модели [26]. Следует отметить, что решение полной замкнутой задачи можно ожидать в будущем из-за ее сложности. Даже решаемая в настоящее время задача Стефана, с фазовым переходом и с конвективным теплообменом - это не простая задача, поскольку она осложнена тем, что для ее численного решения необходимо задавать граничные условия на границе раздела фаз (на фронте кристаллизации). Но форма и положение этой границы изменяются со временем и априори не известны, и могут определяться только в процессе решения самой задачи [27, 28]. Для решения задачи Стефана в данной постановке существуют итерационные методы с выделением и уточнением положения фронта кристаллизации, на котором задаются граничные условия, в частности для уравнения энергии – это условие Стефана. При исследовании конвективного течения в MZ используют математические модели, предполагающие ламинарное устойчивое течение расплава. Кроме этого, следует отметить еще одну из сложностей, что конвективное течение расплава нелинейно зависит от геометрических и теплофизических параметров и может иметь неустойчивый характер - бифуркации [6, 29, 30, 37], и как следствие этого, фронт кристаллизации может быть неустойчивым. Причина неустойчивости роста кристалла может быть обусловлена гидродинамикой и теплообменом расплава или кинетикой роста, например, концентрационным переохлаждением [6]. В работе [30] исследована гидродинамическая неустойчивость

межфазной границы при кристаллизации галлия методом зонной плавки в условиях невесомости и показано влияние температурных бифуркаций, вызванных конвекцией Марангони, на структуру и устойчивость азимутального течения расплава. В работе [30] определены корреляционные зависимости азимутального волнового числа от отношения сторон жидкой зоны. Неустойчивость конвективного течения в MZ (mushy layers ML) подробно была исследована в линейном и нелинейном приближениях в работах [30, 31, 37]. В работе [31] было введено понятие идеального mushy слоя, приведены нейтральные кривые для волнового числа и чисел Рэлея и показаны границы устойчивости течения и границы существования двух режимов: 1) моды mushy-layer (mushy слоя) и моды пограничного слоя. Также в этой работе проведено сравнение результатов ширины ML с экспериментальными данными при замерзании морской воды, показавшее хорошее совпадение.

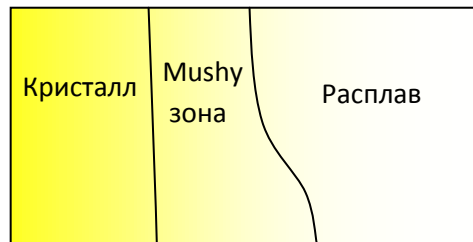


Рис.1 Схема расположения mushy зоны (MZ).

Изучение теплофизических свойств, гидродинамики и теплообмена в MZ при получении из расплавов металлических, оксидных и полупроводниковых материалов имеет ряд причин, во-первых – это исследование свойств и кинетики химических и физических процессов в MZ для создания и улучшения технологий получения совершенных материалов. Во-вторых, изучение MZ необходимо для уточнения математических моделей процессов кристаллизации и методов их решения, являющихся инструментом для исследования процессов создания новых материалов, поскольку свойства, реология, гидродинамика и теплоперенос в MZ сильно искажают гидродинамику и теплообмен около фронта кристаллизации, что напрямую влияет на рост кристалла. Исследование и определение реологических свойств материала в MZ и их зависимостей от состава расплава, гидродинамики и тепловых условий – это отдельная и сложная задача для каждого ростового процесса, зависящая

от теплофизических условий и состава расплава. В работе [32] численно исследовалось в пограничном слое течение неньютоновской жидкости с вязкостью, зависящей от температуры. Авторами работы [32] было показано, что на теплообмен влияет степень нелинейности зависимости вязкости жидкости от температуры, и показано, что эта зависимость автомодельна относительно числа Прандтля и не оказывает влияния на сопротивление.

Во многих работах, например, [11,14,33-38], при построении моделей для исследования течений в МЗ остаются в приближении ньютоновской жидкости, и вместо (или кроме) зависимости теплофизических свойств расплава от температуры в МЗ используют предположения о пористости среды в МЗ на основе закона Дарси и его модификаций для МЗ. Обзоры работ, посвященных моделированию конвективного теплопереноса в МЗ с введением пористости в МЗ можно найти в работах [5,11,39,40]. Характеристики пористости МЗ и реология расплава могут влиять на течение и теплообмен в МЗ, кроме этого на свойства расплава и на пористость в МР могут влиять гидродинамические и теплофизические характеристики процесса выращивания монокристаллов. Факторами, управляющими течением расплава и распределением температуры и примеси в нем, могут быть, например: тепловые и магнитные поля, вращения, микрогравитация [41], вибрации [42-44] и другие. Вибрационное воздействие является одним из эффективных способов активации и управления течением расплава в МЗ, поэтому это является хорошей мотивацией исследований влияния вибраций на конвективное течение расплава в МЗ, поскольку работ в этой области мало.

В работах [42-44] было показано влияние вибраций на динамические и температурные пограничные слои при выращивании кристаллов. Показано было, что вибрациями можно уменьшить ширину пограничных слоев и увеличить градиент температуры на фронте кристаллизации.

В диссертационной работе [45] приведены расчеты моделирования космического эксперимента по затвердеванию сплава олова для пониженной гравитации ($10^{-3}g$) без учета и с учетом вибрационного воздействия от космической станции (g -jitter). Расчеты автора работы [45] показали, что при пониженном уровне

гравитации ($10^{-3}g$) макросегрегация отсутствует и наблюдается диффузионный режим распределения примеси. Автор работы [45] отмечает, что вибрации (g-jitter) оказывают влияние на распределение примеси только когда , амплитуда вибраций больше $10^{-2}g$, а частота практически не оказывает влияния, в исследованном диапазоне частот от 1 до 100Гц.

В данной работе рассматриваются конвективные процессы теплообмена в MZ при затвердевании с точки зрения механики сплошной среды, то есть на макроскопическом уровне. На примере модельной задачи с учетом пористости в MZ будет рассмотрено влияние вибраций на конвективное течение в MZ.

2. Математическое моделирование

При кристаллизации (плавлении) на фронте кристаллизации происходит фазовый переход с выделением (поглощением) тепла и оттеснением примеси. На фронте кристаллизации должны выполняться балансы потоков тепла и массы. Например, для баланса тепла в модели с выделенным фронтом кристаллизации, граничное условие Стефана [7, 39] можно записать в следующем безразмерном виде:

$$\frac{1}{Pr} \left(\left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_l - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_s \right) = -St V_n , \quad (1)$$

где T- температура, λ - теплопроводность, l и s указывают направление потока тепла со стороны расплава и кристалла, соответственно, V_n – проекция скорости кристаллизации на нормаль \mathbf{n} , проведенной к поверхности фронта кристаллизации, Pr – число Прандтля, St – число Стефана. Для расплава с примесями на фронте кристаллизации необходимо выполнение условия для баланса потоков массы, аналогичного условию (1). Задание и выполнение условий (1) на межфазной границе (фронте кристаллизации), положение которой неизвестно и определяются из решения задачи Стефана, накладывает дополнительные сложности на численный алгоритм решения задачи Стефана. Для численного решения задачи Стефана с выделением фронта кристаллизации необходимо использовать итерационные методы с адаптивными сетками или с преобразованием системы координат. Обзор данных методов решения задачи Стефана можно найти в работе [40].

Кроме методов с выделением фронта кристаллизации и с заданием на нем условия Стефана, существуют более простые в реализации численные модели и методы, так называемого, «сквозного счета» во всей области, включающей расплав, кристалл и фронт кристаллизации, без выделения границы раздела, этот метод использовался в работах [11-13,33-36]. Методы сквозного счета с точки зрения численного моделирования является более простыми, поскольку в этом случае выбор расчетной сетки не привязан к форме и положению фронта кристаллизации. Это так называемые метод фиктивных областей с «замораживанием» решения вязкостью в твердой фазе или другой энтальпийный подход, когда уравнение для переноса энергии записывается в энтальпийной форме, в котором используют то свойство, что энтальпия имеет постоянные, но разные значения в расплаве и кристалле и изменяется только в узком диапазоне температуры (на фронте кристаллизации, между температурой ликвидуса и солидуса), где значение плотности энтальпии обычно аппроксимируется линейной функцией. Математическая модель задачи в данной постановке описывается уравнениями Навье-Стокса для конвекции несжимаемой жидкости с уравнением переноса энергии в энтальпий форме, концентрации и определяется геометрическими параметрами, теплофизическими свойствами материала, тепловыми и динамическими условиями. Течения расплава с нерастворенными в нем вторичными включениями (например, жидкость-твердое или жидкость-жидкость), скорости которых не определены и не равны скорости расплава, могут моделироваться системой уравнений многофазной гидродинамики, включающими уравнения движения для каждой из компонент [46]. В случае, когда скорости вторичных фазовых включений известны или равны скорости основной фазы - расплаву математическую модель движения расплава можно свести (осреднением по объему или по свойствам) к модели движения однофазной жидкости-расплава.

Модель конвективного тепломассообмена с учетом кристаллизации основана на системе уравнений Навье-Стокса для ньютоновской несжимаемой жидкости, с осредненными по свойствам, состоящей из уравнения сохранения массы:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla(\rho u) = 0 \quad (2)$$

уравнения сохранения импульса:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla(\rho u u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \nabla(\mu \nabla u) + \rho g_x - F_x \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla(\rho u v) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \nabla(\mu \nabla v) + \rho g_y - F_y \quad (4)$$

уравнения сохранения энергии, которое в энтальпийной форме можно записать так:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla(\rho u h) = \nabla\left(\frac{\lambda}{c_s} \nabla h\right) + S_h \quad (5)$$

и уравнения сохранения концентрации растворенного компонента:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \nabla(\rho u C) = \nabla(\rho D \nabla C) + S_c \quad (6)$$

(в случае многокомпонентного состава, для каждой компоненты можно записать уравнение переноса ее концентрации (6), с учетом выполнения баланса общей массы). В уравнениях (1)-(5) $\mathbf{u}(u,v)$ – вектор скорости ($\rho u = (1 - \alpha)\rho_s u_s + \alpha\rho_l u_l$), P – давление, μ – динамическая вязкость, $\mathbf{g}(g_x, g_y)$ – вектор ускорения силы тяжести с проекциями на оси координат g_x, g_y , $\rho = (1 - \alpha)\rho_s + \alpha\rho_l$ – плотность, индексы l и s относятся к расплаву и кристаллу, соответственно, $h = \int_0^T c_s dT$ – энтальпия, то есть для кристалла и расплава, соответственно $H_s = h$, $H_l = h + \Delta H$, где $\Delta H = \int_0^T (c_l - c_s) dT + \Delta L$, где T – температура, c_s и c_l теплоемкости кристалла и расплава, $\lambda = (1 - \alpha)\lambda_s + \alpha\lambda_l$ – теплопроводность, D – коэффициент диффузии, ΔL – удельная скрытая теплота кристаллизации. Правые части в уравнениях (4) и (5) можно записать в виде, как в [33-36]:

$$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha \Delta H) - \nabla(\rho \mathbf{u} \Delta H) \quad (7)$$

$$S_c = \frac{\partial}{\partial t}\left(\left(\frac{1}{k_c} - 1\right) \alpha C_s\right) - \nabla\left(\left(\frac{1}{k_c} - 1\right) \rho \mathbf{u} C_s\right) \quad (8)$$

где k_c – равновесный коэффициент распределения примеси в расплаве и кристалле $C_s = k_c C_l$, α – объемная доля жидкой фракции ($0 \leq \alpha \leq 1$, принимает значение $\alpha = 1$ – если в данной точке области, расплав и $\alpha = 0$ – если кристалл).

Наличие в расплаве MZ (около фронта кристаллизации) во многих работах, например, в [11-14, 33-36, 39] моделируется введением в этой области пористой среды. Для этого в MZ учитывается сила сопротивления движению расплава со стороны пористой среды, которая на основе закона Дарси- Буссинеска [46-48]

$$\text{grad } P = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u}, \quad (9)$$

можно записать в виде

$$\mathbf{F} = A_0 \mathbf{u}, \quad (10)$$

(где K – проницаемость пористой среды). В уравнениях переноса импульса (3)-(4) в правую часть добавлены источники члены - проекции F_x, F_y силы $\mathbf{F}(F_x, F_y)$ на оси координат. Величина A_0 обратно пропорционально зависит от проницаемости среды, вязкости и морфологии пористого тела. A_0 определяется размером mushy зоны, пористостью и структурой (дисперсной, псевдожидкой, дендритной, с подвижными или неподвижными твердыми включениями). Чем больше значение A_0 , тем сильнее становится демпфирование расплава в MZ, и тем быстрее скорость падает до нуля, когда материал затвердеет, а при A_0 скорости расплава максимальны вследствие отсутствия сопротивления конвективному движению со стороны твердого скелета. В данной модели в твердом теле скорости обнуляются.

Проницаемость реальных пористых тел может меняться на несколько порядков, поэтому, учитывая большое разнообразие пористых сред, определение закона подобия для описания проницаемости - это не простая проблема, подробнее смотрите в работах [46-49]. Полуэмпирические подходы были предложены для решения этой проблемы еще около ста лет назад независимо Козени [50] и Карманом [51], ими были получены зависимости проницаемости от пористости среды, которые в дальнейшем получили название закона Козени-Кармана:

$$k_{absolute} = \frac{d^2 k_p^3}{k_{ck}} \quad (11)$$

Следует отметить, что характер зависимости (11) был известен до работ Козени и Кармана, например, одним из первых, получившим экспериментально для коэффициента фильтрации песка квадратичную зависимость от диаметра частиц был А. Хазен (Allen Hazen). Закон Козени-Кармана (11) учитывает абсолютную проницаемость среды $k_{absolute}$, как функцию пористости k_p и масштаба длины зерен пористой среды d , k_{ck} - коэффициент Козени-Кармана, который, например, в случае фильтрации воды в пористой среде, засыпанной твердыми сферами диаметром d приблизительно равен $k_{ck}=5$. [52]. Во многих работах различными исследователями

было показано, что для моделирования пористой среды, варьируя значения константы k_{ck} , можно учитывать иную геометрию и морфологию зерен пористой среды, отличную от засыпки с правильными неподвижными сферами. В работе [46] в зависимости для проницаемости в качестве масштаба длины рассматривается удельная объемная концентрация площади пор, таким образом, учитывается морфология пористой среды. Следует отметить, что формула (11) носит не универсальный характер, например, в работе [52] качественно было показано, что для учета неоднородности морфологии микроструктур пористой среды необходимы более сложные зависимости проницаемости от свойств пористой среды, о чем также говорится и в других работах, например в [58]. Обзор использования и применимости закона Козени-Кармана можно найти в работе [52] и в диссертации [16], где в специальном приложении к работе приводятся различные зависимости для проницаемости в МЗ. Следует заметить, что линейный закон Дарси (9) также имеет ограничения по точности описания течения в пористой среде и применимости (например, течение должно быть ламинарным). Существуют описания пористой среды обобщенным законом Дарси, а также модели пористой среды не в рамках закона Дарси [60].

Используя закон Дарси и для проницаемости закон Козени-Кармана (11), силу сопротивления в уравнениях (3)-(4) можно записать через объемную долю жидкой фракции α (см., например [5,11, 33-36]):

$$\mathbf{F} = \frac{(1-\alpha)^2}{\alpha^3} A_{mushy} \mathbf{u}, \quad (11)$$

где величина A_{mushy} обратно пропорционально проницаемости среды и зависит от вязкости и в общем случае от структуры пористого тела.

Уравнения (2)-(11) учитывают наличие в МЗ фазы, отличной от расплава, но уравнения движения записаны, как для однофазной жидкости с осредненными коэффициентами, как в работах [33, 34]. Источниковый член для уравнения переноса примеси (8) может иметь иной вид, как это описано в работе [36], в зависимости от модели диффузии примеси в кристалле. Модель, предложенная в работах [54,55] сведена к однофазной модели путем осреднения по объему двухфазной модели с учетом реакций эвтектического затвердевания.

Уравнения (2)-(8) можно записать в безразмерном виде и тогда определяющими параметрами будут безразмерные числа подобия. В безразмерных переменных решали задачу о кристаллизации с учетом пористости в МЗ авторы в работах [8, 18, 30, 39], и для конвекции в пористых средах в работах [56-58].

Задача о конвективном тепломассопереносе при кристаллизации (плавлении) характеризуется следующими определяющими безразмерными числами: Грасгофа $Gr = \frac{g\beta_T\Delta T H^3}{\nu^2}$ (либо числом Рэлея $Ra = Pr \cdot Gr$), Прандтля $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$, Шмидта $Sc = \frac{\nu}{D}$, Рейнольдса $Re = \frac{UH}{\nu}$, вибрационного числа Рейнольдса $Re_v = \frac{A_f f H}{\nu}$, Стефана $St = \rho \frac{\Delta L}{c_{p,l} \Delta T}$, отношением сторон расчетной области $A_R = H/R$, а также отношения, плотностей $\rho = \frac{\rho_s}{\rho_l}$, коэффициентов теплопроводностей $\lambda = \frac{\lambda_s}{\lambda_l}$ и теплоемкостей $c_p = \frac{c_{p,s}}{c_{p,l}}$ расплава и кристалла (в задаче - 1 эти отношения были равны единице, хотя в общем случае теплофизические свойства расплава и кристалла часто не одинаковы). Здесь A_f – амплитуда, $f = \omega/2\pi$ – частота вибраций, α , β_T , ν – коэффициенты температуропроводности, теплового расширения, кинематической вязкости, соответственно; $H, U, \Delta T$ – характерные масштабы длины, скорости и температуры. Пористая среда характеризуется числом Дарси $Da = \frac{K}{H^2}$. Зависимость проницаемости в МЗ от структуры пористой среды может характеризоваться безразмерным числом Слихтера Sl , зависящее от пористости и структуры пористого. Следует отметить, что при другом выборе масштабов скорости, конвективное течение в пористой среде может характеризоваться другим безразмерным аналогом числа Рэлея - числом Рэлея-Дарси (или фильтрационным числом Рэлея): $Ra^* = Ra \cdot Da = \frac{g\beta_T\Delta T H K}{\nu \alpha}$, например, как это было сделано в работах [56, 57]. В работе [56] получен важный факт, что длина волны конвективной структуры, соответствующей максимальной теплопередаче, резко уменьшается при увеличении фильтрационного числа Рэлея. В работе [57] исследован сопряженный теплообмен пористого слоя с теплопроводной пластиной конечной толщины при различных условиях массообмена с внешней средой, развито приближение пограничного слоя и в безразмерных

переменных получены асимптотические решения для сопряженного теплообмена в условиях внешней и внутренней задач.

В работе [8] проведено численное моделирование конвективного теплообмена в безразмерных переменных при получении суперсплавов с высокотемпературными примесями. Авторами [18] показано, что увеличение числа Пекле (произведение числа Рейнольдса на число Прандтля) уменьшает MZ и конвективные скорости.

В работе [58] было проведено математическое моделирование в безразмерных переменных вихрь-функция тока нестационарных режимов естественной конвекции в замкнутой пористой цилиндрической полости с теплопроводной оболочкой конечной толщины в условиях конвективного теплообмена с внешней средой. Проанализировано влияние проницаемости пористой среды в диапазоне чисел Дарси $10^{-5} < Da < \infty$. Показано, что начиная с $Da = 10^{-4}$ наблюдается формирование погранслоного режима переноса тепла и переход от кондуктивного механизма к конвективному механизму теплопередачи.

Авторами работы [59] предложен алгоритм визуализации MZ , используя математическую модель электродинамики и свойство изменения электрической проводимости в MZ .

3. Результаты расчетов

В данной работе изучение влияния MZ на конвективный теплоперенос было проведено с учетом величины пористости в MZ для разных значений безразмерных параметров и коэффициента A_{mushy} из уравнения (11).

В качестве задач о влиянии MZ на теплообмен были рассмотрены следующие две модельные задачи о направленной кристаллизации:

1) Задача -1 о конвективном теплообмене при горизонтальной кристаллизации в области квадратной геометрии с наличием фазового перехода и MZ .

2) Задача -2 о конвективном теплообмене при кристаллизации теллурида кадмия CdTe вертикальным методом Бриджмена, с вибрационным воздействием на расплав погруженным диском, с наличием фазового перехода и учетом MZ.

Численное моделирование первой задачи было проведено для расплавов в широком диапазоне безразмерных параметров (числами Прандтля $Pr=0.01-400$, Стефана $St=0-100$ и числа Дарси $Da=10^{-8}-10^{-2}$).

3.1. Влияние определяющих безразмерных параметров на гидродинамику и теплообмен в расплаве при направленной кристаллизации

Постановка модельной задачи-1 о конвективном теплообмене при горизонтальной кристаллизации в области квадратной геометрии с наличием фазового перехода и MZ следующая:

Рассматривается направленная кристаллизация в квадратной области, заполненной расплавом в поле силы тяжести, горизонтальные границы теплоизолированы, на вертикальных стенках заданы постоянные значения температуры $T_1=1$ и $T_2=0$ (рис.2). Горизонтальный вариант направленной кристаллизации выбран намеренно, как случай с конвективным ламинарным течением, исключаящим немонотонный и пороговый характер конвекции. Численная модель задачи основана на решении уравнений Навье-Стокса и уравнения энергии в энтальпийной форме в безразмерных переменных.

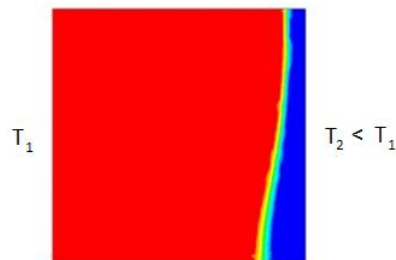
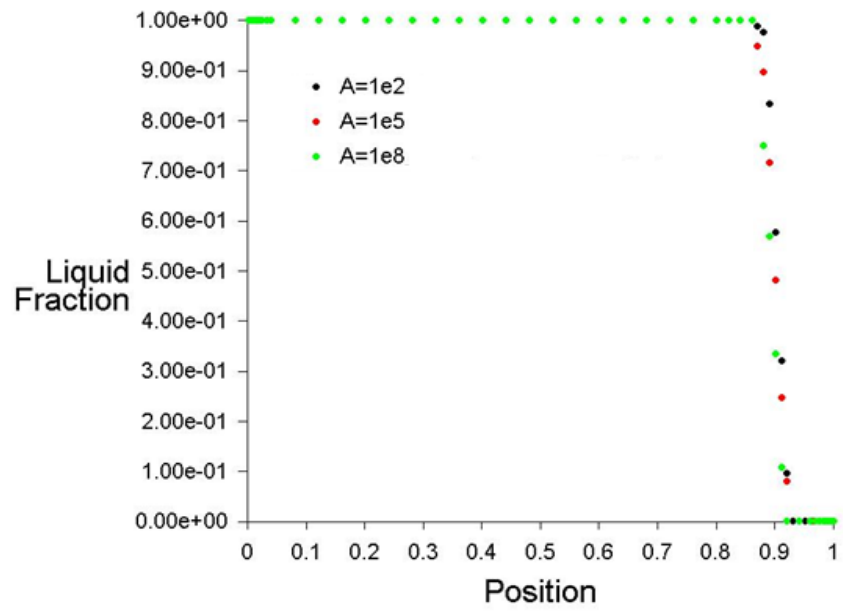
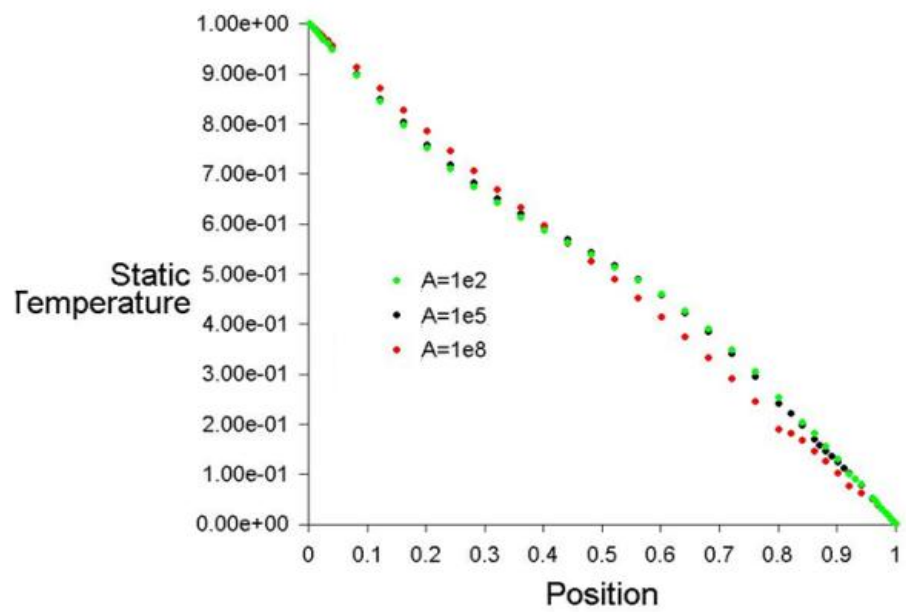


Рис. 2. Схема расчетной области

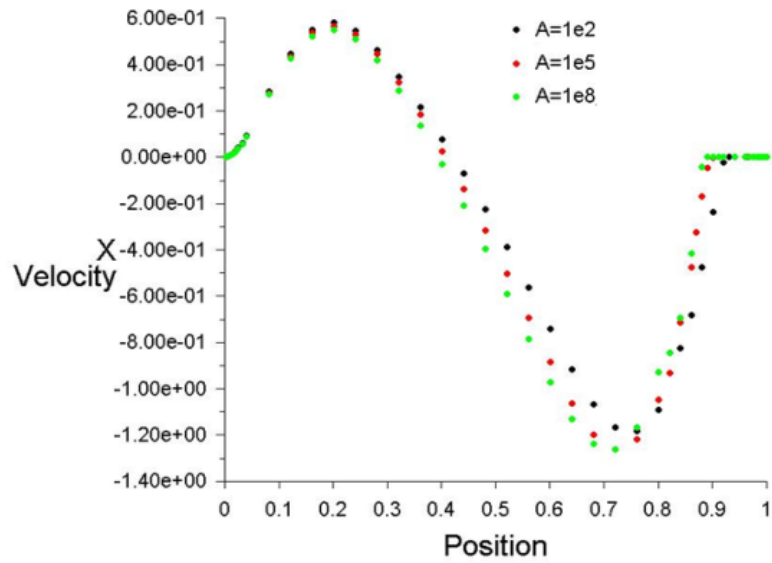
Влияние числа Дарси $Da=A^{-1}$ ($Gr=10^3$, $Pr=0.4$, $St=0.1$)



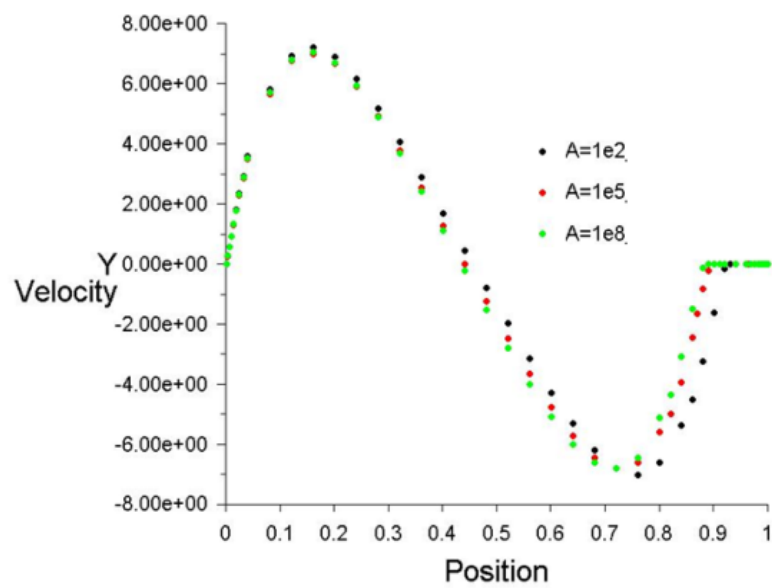
a)



б)



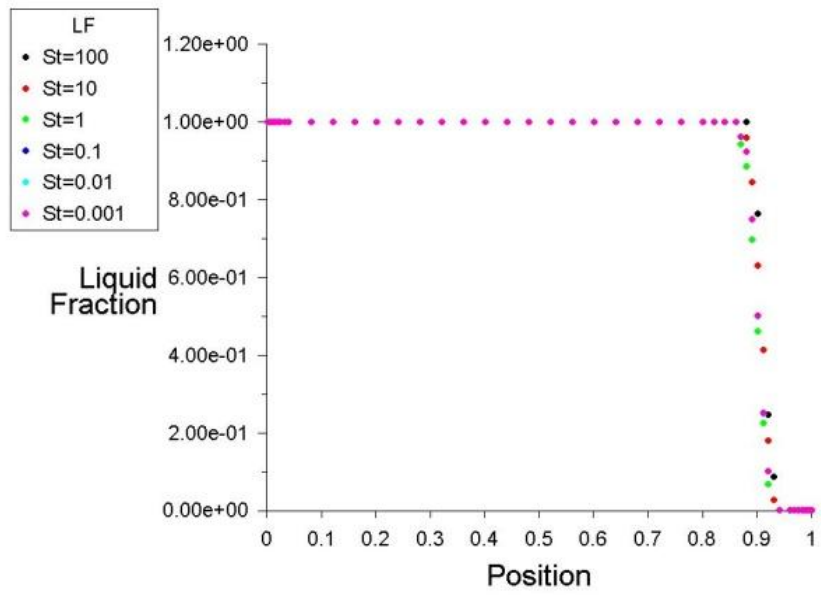
B)



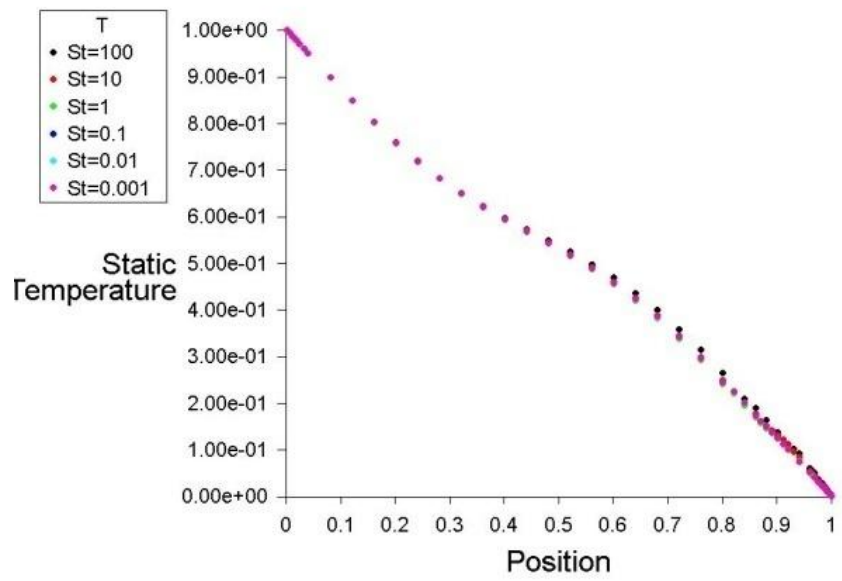
Г)

Рис. 3. Распределения доли расплава, температуры и скорости в среднем горизонтальном сечении для разных значений числа Дарси ($Da = A^{-1} = 10^{-8}, 10^{-5}, 10^{-2}$):
 а) - доли расплава, б) - температуры, в) - горизонтальной компоненты скорости,
 г) - вертикальной компоненты скорости.

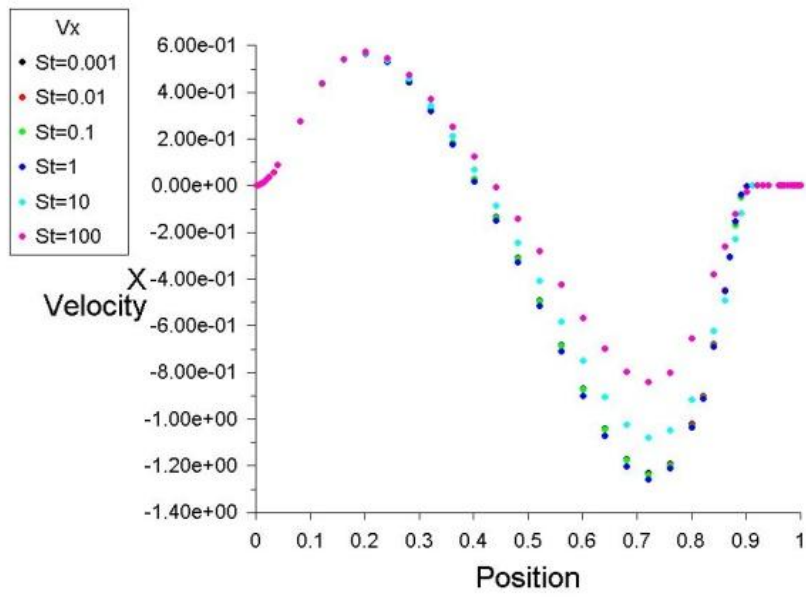
Влияние числа Стефана St ($Gr=10^3$, $Pr=0.4$, $Da=10^{-5}$)



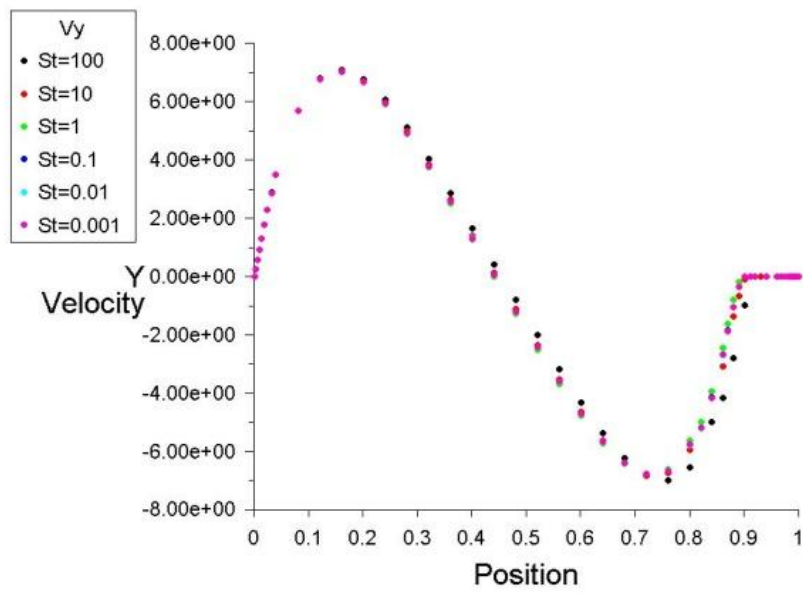
a)



б)



в)



г)

Рис. 4 Распределение в среднем горизонтальном сечении а)-доли расплава, б)- температуры, в)- горизонтальной компоненты скорости, г) вертикальной компоненты скорости для разных чисел Стефана

Влияние числа Прандтля Pr ($Gr=10^3$, $St=1$, $Da=10^{-5}$)

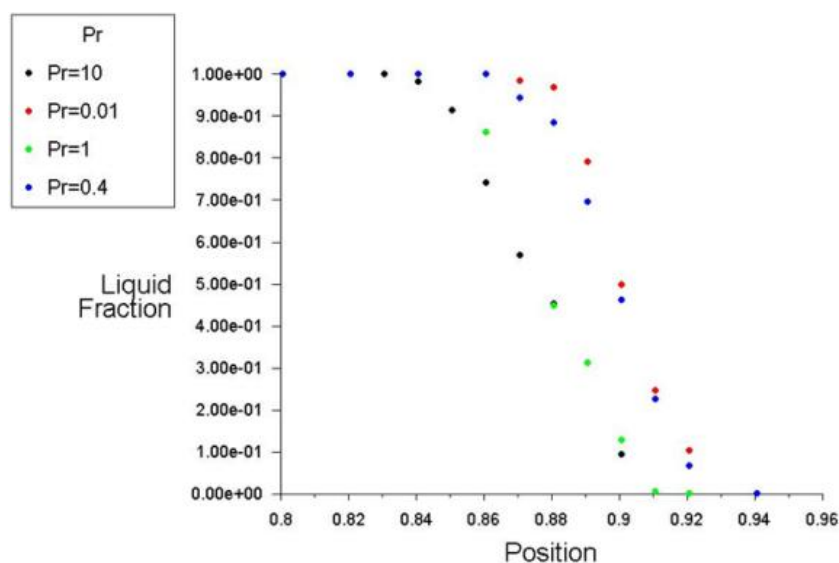


Рис. 5 Распределение доли расплава в среднем горизонтальном сечении у фронта кристаллизации.

На рис.5 представлены графики положения MR в расплавах с разными числами Прандтля для одинаковых начальных и граничных тепловых условий ($Gr=10^3$, $St=1$, $Da=10^{-5}$).

Влияние числа Дарси Da в данном диапазоне значений незначительно сказывается на средние поля скоростей и температур около фронта кристаллизации на стационарных режимах и, как следствие практически не влияют на форму фронта кристаллизации. Можно сделать вывод, что при $Pr=0.4$ влияние на температурное поле и форму фронта кристаллизации незначительное. Следует отметить, что даже эти незначительные изменения в скоростях могут существенно влиять на распределение примесей с большими числами Шмидта, а также при более интенсивной конвекции, на нестационарных режимах и при учете многокомпонентности и реологии MZ.

3.2. Конвективный теплообмен при кристаллизации теллурида кадмия CdTe вертикальным методом Бриджмена с вибрационным воздействием на расплав

Постановка модельной задачи-2 следующая:

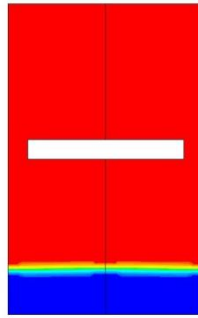


Рис.6 Схема расчетной области для задачи-2.

Расчётная область показана на рис.6, где растущий кристалл внизу, диск толщиной 0.5см и радиусом 2см, погруженный на 4см в расплав совершает вибрации малой амплитуды A_f и частотой f ($R=2.5$ см – радиус тигля, $H=8$ см – высота тигля, Ox – ось симметрии).

В данной модели рассматривалась осесимметричная область скорость кристаллизации, граничные условия и свойства предполагались постоянными. Исследуются вибрации с малыми амплитудами, то есть перемещения вибратора пренебрегается, а на вибраторе задается только скорость его перемещения в виде гармонической функции $v = A_f \omega \sin(\omega t)$, где A_f и $f = \omega / 2\pi$ – амплитуда и частота вибраций, соответственно. Предполагается, что граничные условия постоянны по времени, кроме скорости на вибраторе, хотя в реальности они могут изменяться во времени. Верхняя граница свободная с постоянной температурой $T = 1400^0 \text{ К}$, на нижней температура $T = 1360^0 \text{ К}$ (температура кристаллизации $T_{кр} = 1365^0 \text{ К}$), боковая стенка теплоизолирована, Начальные условия: $t = 0$, $u = 0$, $v = 0$, $T = 1382^0 \text{ К}$.

Основные значения этих теплофизических параметров соответствовали расплаву CdTe (см. таблицу 1). В работе рассматриваются гармонические вибрации,

совершаемые с помощью погруженного в расплав диска, с амплитудой $A_f = 100\mu\text{m}$ и частотами $f = \omega/2\pi = 0-30$ Hz.

Таблица 1. Свойства для численного моделирования Задачи -2.

Thermal Conductivity (W/m K)	CdTe _{solid}	0.907
Density, (kg/m ³)	CdTe _{liquid}	1.085
Heat Capacity (J/kg K)	CdTe _{solid} (1360 ^o K)	5727
Heat of fusion (J/kg)	CdTe _{liquid} (1370 ^o K)	5663.6
Melting temperature (K)	CdTe _{solid}	159.5
Viscosity, kg/m s	CdTe _{liquid}	187
Thermal expansivity (K ⁻¹)	CdTe	2.26×10 ⁵
Thermal diffusivity (cm ² /s)	CdTe _{liquid} (1365 ^o K)	2.354×10 ⁻³
	CdTe _{solid}	6.3952×10 ⁻⁵
	CdTe _{liquid}	1.03×10 ⁻²

Характеристики течения осредненного по времени течения определялись по формуле

$$\Phi_{\text{average}} = \frac{1}{t_{\text{max}}} \int_0^{t_{\text{max}}} \Phi dt, \quad (12)$$

где t – время, $[0, t_{\text{max}}]$ – диапазон осреднения.

Следует отметить следующее: во-первых, то, что расчеты проводились с таким шагом по времени, что на один период колебаний приходилось более ста расчетных шагов по времени; во-вторых, то, что все представленные в данной работе результаты относятся к моментам времени, когда осредненное течение имеет установившийся квазистационарный характер, осредненных характеристик по формуле (12). Было рассмотрено влияние вибраций на конвективное течение для разных параметров на квазистационарном режиме, но для одного положения фронта кристаллизации.

На рис.7 для CdTe для $A_{\text{mushy}}=10^5$ (11) и частот $f=0, 10, 20, 30$ Гц показаны распределения функции тока, компонент скорости изотермы и распределение доли жидкой твердой фракций с фронтом кристаллизации и положением MZ. На рис. 7 представлены изолинии средних по времени величин (12), кроме функции тока, функции доли фракций и случая без вибраций $f=0$.

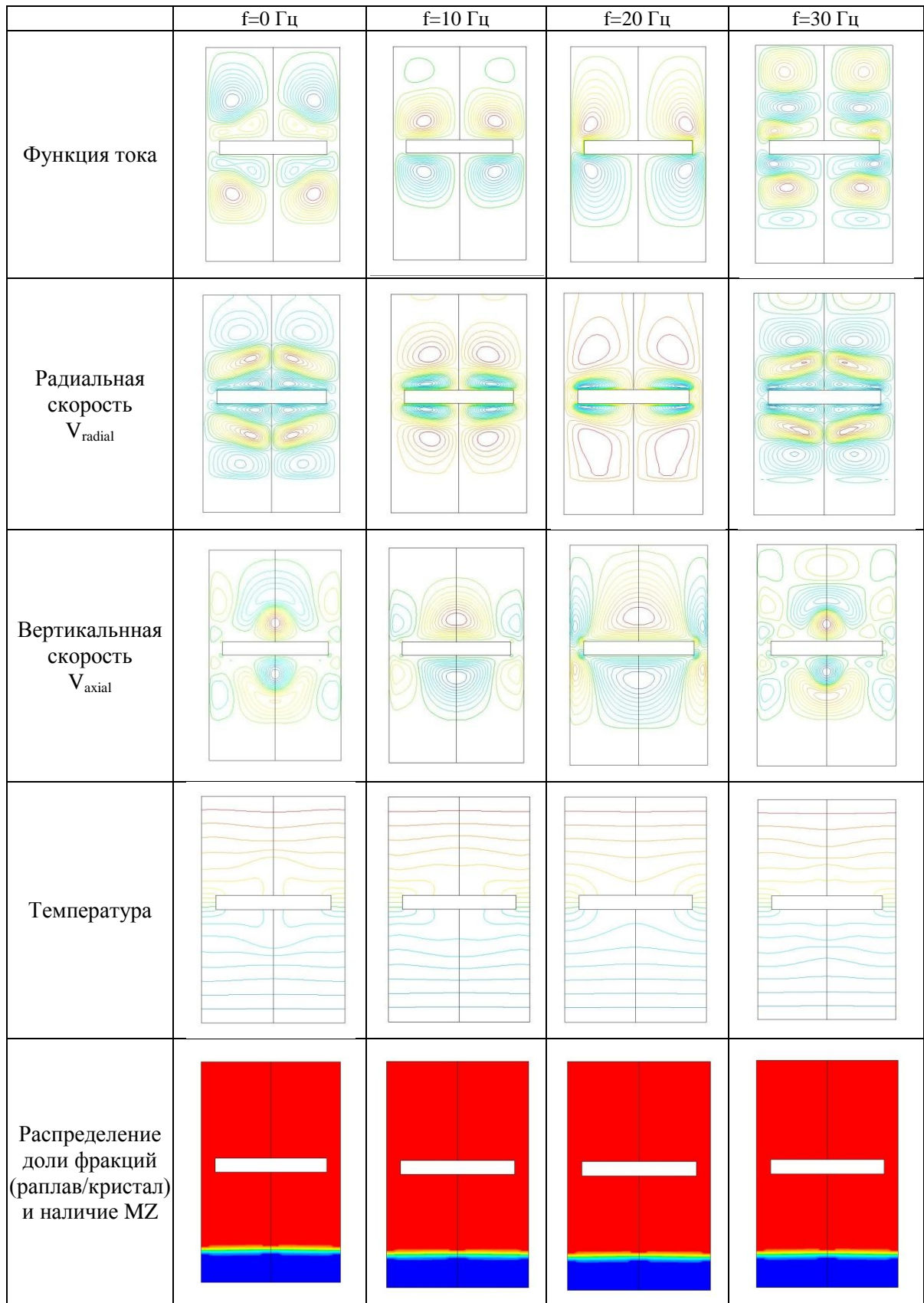
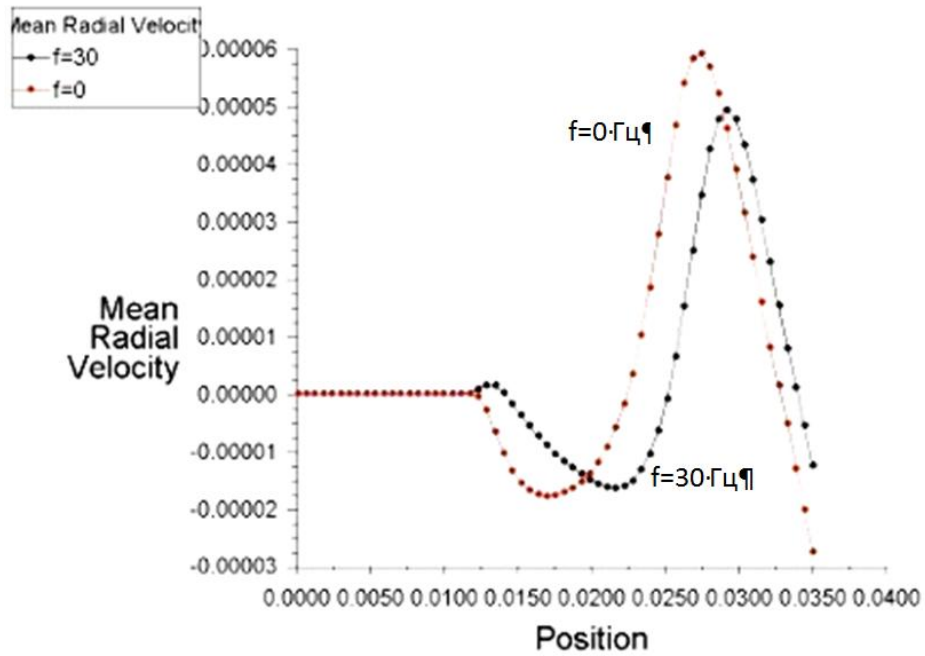
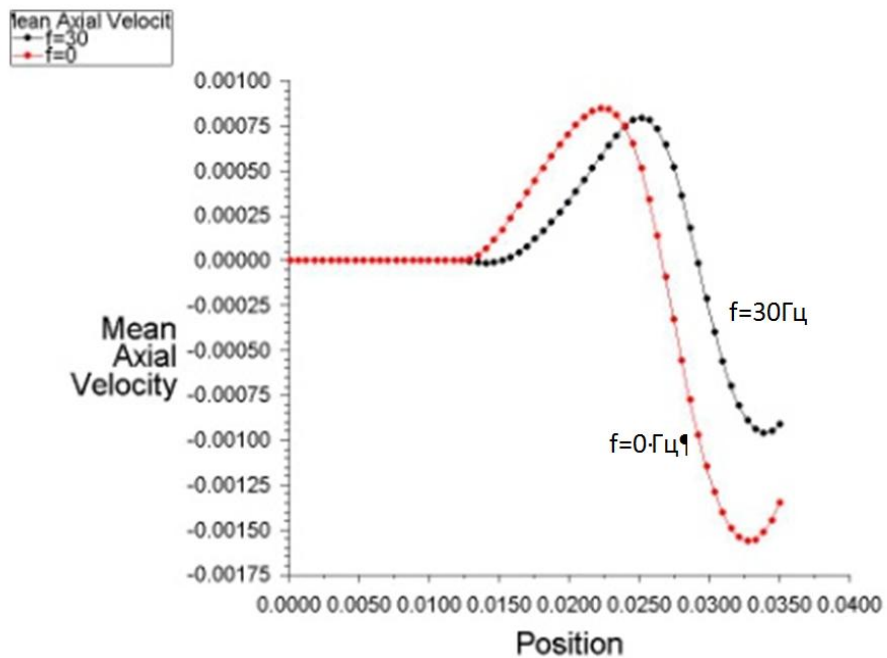


Рис.7 (см. рисунок на предыдущей странице)

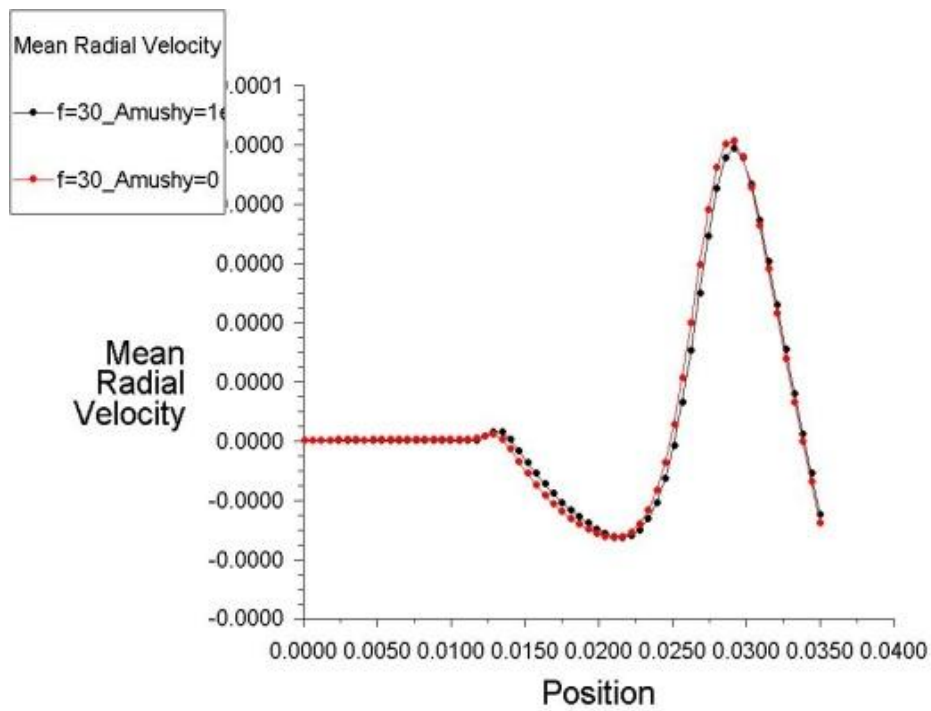


a)

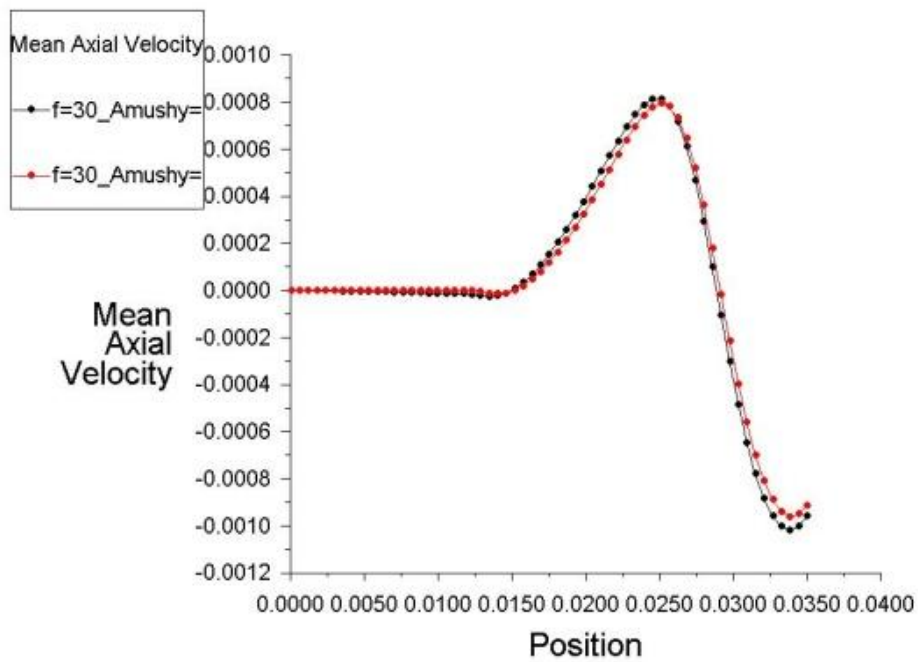


б)

Рис.8. Распределение компонент вектора скорости по оси тигля около фронта кристаллизации (средних по времени для $f=30$ Гц и мгновенных для $f=0$ Гц):
 а)- горизонтальные, б) – вертикальные.

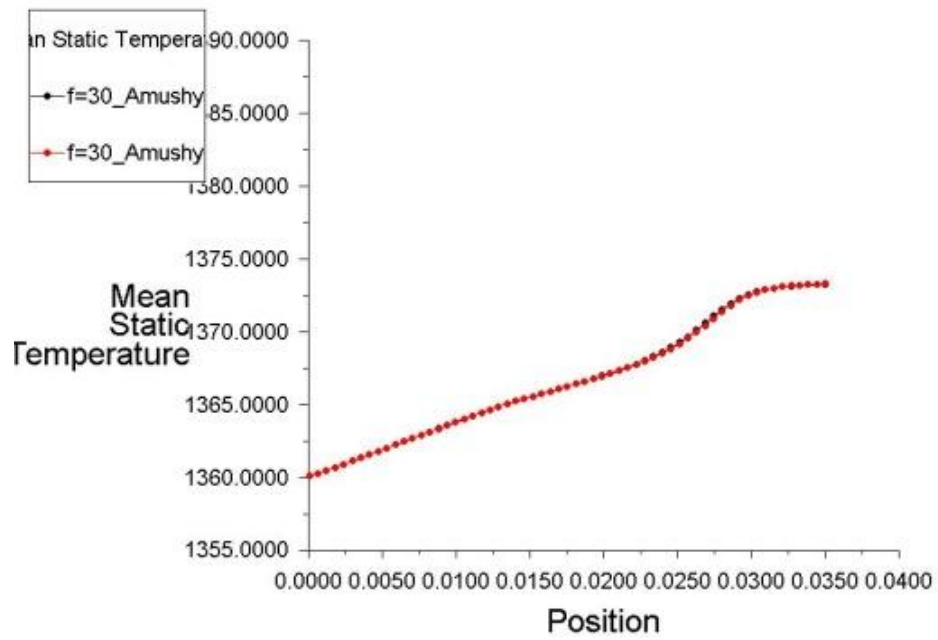


a)

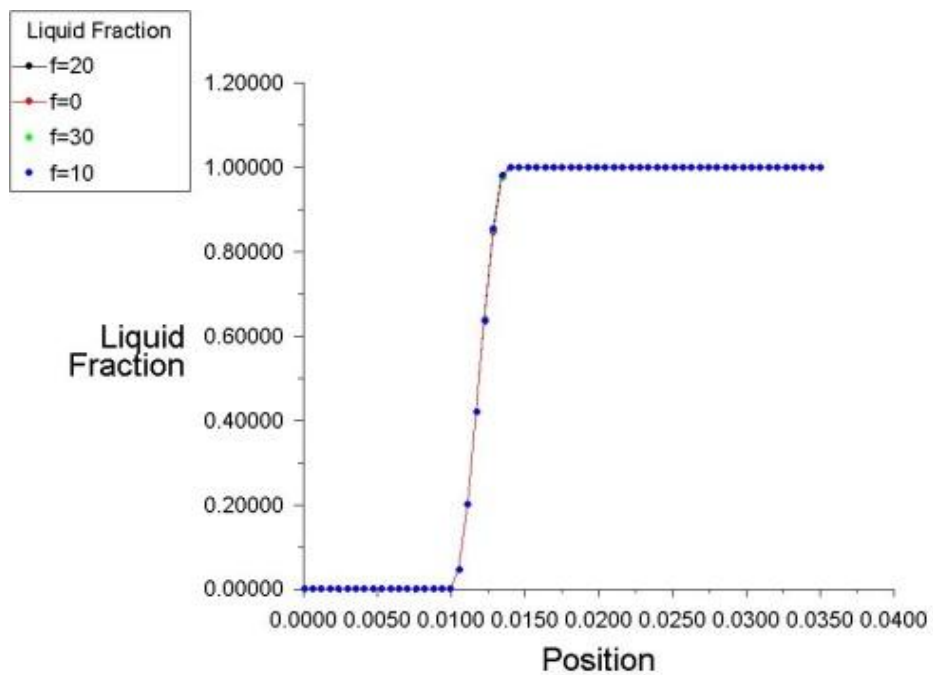


б)

Рис.9. Распределение средних по времени компонент вектора скорости по оси тигля около фронта кристаллизации (линии для $A_{mushy}=0$ и $A_{mushy}=10^5$ совпадают):
 а)- горизонтальные компоненты вектора скорости,
 б) – вертикальные компоненты вектора скорости.



a)



б)

Рис.10 Распределение по оси тигля около фронта кристаллизации:
 а) – температуры (линии для $A_{mushy}=0$ и $A_{mushy}=10^5$ совпадают)
 б) – доли расплава (линии для частот $f=0-30$ Гц совпадают)

Представленные результаты на рис.7-10 показывают влияние частоты вибраций на течение расплава для значения коэффициента $A_{mushy}=10^5$, характеризующего MZ (A_{mushy} - обратно пропорционально проницаемости пористой среды в MZ). Влияние вибраций (на квазистационарном режиме, при заданных: поле температуры, расположении вибратора, диапазонах амплитуд и частот) не значительно сказывается около фронта кристаллизации на изменении средних полей скоростей и температуры в MZ, и, как следствие, практически не влияют на форму фронта кристаллизации CdTe.. Следует отметить, что для данных или других условий, но при учете примесей (обычно они имеют большие значения чисел Шмидта) вибрационные воздействия могут существенным образом изменять распределение компонент расплава у фронта кристаллизации и, как следствие из диаграммы фазового перехода, изменять параметры фазового перехода, что может оказывать влияние на форму фронта и скорость кристаллизации.

Литература

1. M. C. Flemings and G. E. Nereo, "Macroseggregation, Part I," Trans. TMS-AIME, Vol. 239, 1967, p. 1449.
2. M. C. Flemings, R. Mehrabian, and G. E. Nereo. "Macroseggregation, Part II," Trans. TMS-AIME, Vol. 242, 1968, p. 41.
3. M. C. Flemings and G. E. Nereo, "Macroseggregation, Part II," Trans. TMS-AIME, Vol. 242, 1968, p. 50
4. R. Nadella, D.G. Eskin, Q. Du, L. Katgerman. Macroseggregation in direct-chill casting of aluminium alloys. Review Macroseggregation in aluminium alloys. Netherlands Institute for Metals Research, Mekelweg 2, 2628 CD, Delft, The Netherlands. 93p.
5. Christoph Beckermann. Modeling of macroseggregation: past, present and future.. Presented at the Flemings Symposium, Boston, MA, June 2000, 14p
6. M.C. Flemings. Solidification Processing. McGraw-Hill, New York, 1984.

7. M. Wu, A. Vakhrushev, G. Nummer, C. Pfeiler, A. Kharicha and A. Ludwig Importance of Melt Flow in Solidifying Mushy zone. *The Open Transport Phenomena Journal*, 2010, 2, 16-23
8. V. Sahai, R. A. Overfelt, and P. Banerjee Influence of Bulk Convection on Freckle Formation in Castings Superalloys 7X3,625,706 and Various Derivatives Edited by E.A. Loria *The Minerals, Metals 81 Materials Society*, 1997, pp. 107-118.
9. M. O'Leary, Analysis of the Mushy Region in Conduction-Convection Problems with Change of Phase, *Electron. J. Differential Equations*, 1997(1997), No. 04, pp. 1-14
10. Yvan Dutil, Daniel R. Rousse, Nizar Ben Salah, Stéphane Lassue, Laurent Zalewski A review on phase-change materials: Mathematical modeling and simulations. *Journal: Renewable & Sustainable Energy Reviews - Renew sustain energy rev.*, vol.15, No 1, pp. 112-130, 2011.
11. C. Beckermann, R. Viskanta. Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification. *ASME Book No AMR124, Appl. Mech. Rev.*, vol. 46, no 1, January 1993, pp.1-27
12. V. R. Voller and C. Prakash. "A Fixed-Grid Numerical Modeling Methodology for Convection-Diffusion Mushy Region Phase-Change Problems". *Int. J. Heat Mass Transfer*. 30. 1709–1720. 1987.
13. Dutil, Y., Rousse, D.R., Ben Salah, N., Lassue, S., Zalewski L. Mathematical Modeling: Simulations of Phase Change. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 15, Issue 1, January 2011, Pages 112-130.
14. R. Pardeshi, V.R. Voller, A.K. Singh, P. Dutta. An explicit–implicit time stepping scheme for solidification models. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 51 (2008) 3399–3409
15. Edward John PICKERING. Macro-segregation in Steel Ingots: The Applicability of Modelling and Characterisation Techniques. *ISIJ International*, Vol. 53 (2013), No. 6, pp. 935–949

16. S. D. Felicelli. Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys. Dissertation Submitted to the Faculty of the department of aerospace and mechanical engineering In Partial Fulfillment of the Requirements For the Degree of doctor of philosophy with a major in mechanical engineering in the graduate college the University of Arizona 1991, 127p
17. S. Kou. Macrosegregation in electroslag remelted ingots . PhD Thesis. Department of Materials Science and Engineering, Massachusetts Institute of Technology, February 1978, 183p
18. S. Kou, Welding Metallurgy, 2nd edition, John Wiley and Sons, New York, NY (2003)
19. J. LLorca, V.M. Orera. Directionally solidified eutectic ceramic oxides. Progress in Materials Science 51 (2006) 711–809
20. K A Jackson and J D Hunt, Lamellar and eutectic growth Trans. Metall. Soc. A.I.M.E., Vol. 236, 1966, p 1129-1142
21. Mullins,W.W., Sekerka,R.F. The stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy // Journ. Appl. Phys., - 1964, - Vol. 35, -P. 444-451.
22. Szekely J and Jassal AS (1978), An Experimental and Analytical Study of the Solidification of a Binary Dendritic System, *Metall Trans B*, 9B, 389-398.
23. Гуськов А.П. Полосчатое распределение концентрации примеси вследствие неустойчивости межфазной границы. // ДАН, - 1996, - Т. 366. -С. 468-471.
24. A. Guskov. On Linear Analysis of the Movement of the Interface under Directed Crystallization. *Advances in Chemical Engineering and Science*, 2014, 4, 103-119
25. V.R. Voller. A semi-analytical model of micro segregation and coarsening in a binary alloy. *Journal of Crystal Growth* 197 (1999) 333-340
26. V.Voller. A multi-scale/multi-physics modeling framework for solidification systems. Proceedings of Fifth International Conference on CFD in the Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia, 2006, pp.11-14.
27. Мейрманов А. М. Задача Стефана. Новосибирск: Наука. Сиб. Отд., 1986. 240с

28. Рубинштейн Л.И. Проблема Стефана. – Рига: Звайгзне, 1967. – 458 с.
29. P. Guba, M.G Worster. Nonlinear oscillatory convection in mushy layers. *J. Fluid Mech.* (2006), vol. 553, pp. 419–443.
30. M. Lappa and R. Savino. 3D Analysis of Crystal/Melt Interface Shape and Marangoni Flow Instability in Solidifying Liquid Bridges. *Journal of Computational Physics* 180, 751–774 (2002)
31. M. G. Worster. Convection in mushy layers. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1997.29:91-122.
32. Н. В. Селиванов, С. И. Кузьмин. Численное моделирование вынужденного течения в пограничном слое и теплообмена неньютоновской жидкости с учетом зависимости вязкости от температуры. *Теплофизика высоких температур*, том 47, № 6, 2009, С. 921-926
33. Bennon, W.D. and F.P. Incropera, A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—I. Model formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1987. 30(10): p. 2161-2170.
34. Bennon, W.D. and F.P. Incropera, A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—II. Application to solidification in a rectangular cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1987. 30(10): p. 2171-2187.
35. P.J. Prescott, F.P. Incropera and W.D. Bennon, Modeling of dendritic solidification systems: Reassessment of the continuum momentum equation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol.34, (9), pp.2351-2359, 1991
36. V.R. Voller, A.D. Brent and C. Prakash, The modeling of heat, mass and solute transport in solidification systems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol.32, (9), pp.1719-1731, 1989
37. P. Guba, M.G Worster. Free convection in laterally convection. *J. Fluid Mech.*(2006), vol.558, pp.69-78
38. R. Monroe. Porosity in Castings. *AFS Transactions*, 05-245(04), 2005, pp. 1-28.

39. X. Ming. Investigation of transport phenomena in the presence of interfaces: forced convection in composite porous/fluid domains, solidification with a mushy region, and meniscus formation in dip coating processing. PhD Dissertation, North Carolina State University, Mechanical Engineering, Raleigh, NC, 2001, 170p.
40. A. A. Samarskii, P. N. Vabishchevich, O. P. Ivlev, A. G. Churbanov. Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems-a review. *Int J. Heat Mass Transfer*. Vol 36.No 17. pp. 4095-4106, 1993
41. Полежаев В.И., Белло М.С., Везуб Н.А., Дубовик К.Г., Лебедев А.П., Никитин С.А., Павловский Д.С., Федюшкин А.И. Конвективные процессы в невесомости. - М.: Наука, 1991.
42. A. Fedyushkin, N. Bourago, V. Polezhaev and E. Zharikov. The influence of vibration on hydrodynamics and heat-mass transfer during crystal growth. *J.Crystal Growth* v. 275, 2005, p. e1557-e1563
43. Федюшкин. Конвекция, вращение и вибрация - управляющие факторы при выращивании монокристаллов. VIII съезд по теоретической и прикладной механике. Екатеринбург УрО РАН 2001, стр. 576.
44. Федюшкин А.И. Гидродинамика и тепломассоперенос при вибрационных воздействиях на расплав. Сборник трудов XIX Международной конференции « Математические методы в технике и технологиях», Т.3, Воронеж, 2006, стр 29-34.
45. Huang-Wen Huang. Numerical simulation of directional solidification of binary alloys with high thermal gradients. A Dissertation for the degree of doctor of philosophy with a major in mechanical engineering the University of Arizona, UMI Microform 9720587, USA, 1996, 160p.
46. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Т 1, -Москва, Наука, 1987, 463 с.
47. Кочина П.Я., Кочина Н.Н. Гидромеханика подземных вод и вопросы орошения. Москва. Изд. физ-мат. литературы, 1994, 241 с.
48. Гольдберг В.М., Скворцов Н.П. Проницаемость и фильтрация в глинах. -М. Недра, 1986, -160 с

49. В. П. Бушланов, Е. Н. Сентякова, И. В. Бушланов. О топологической зависимости коэффициента проницаемости в законе фильтрации Дарси Вестник Астраханского государственного технического университета, Сер.: Морская техника и технология. - 2012. - № 1. - С. 94-102
50. J. Kozeny, Wien, Akad. Wiss. 136 (1927) 271.
51. P.C. Carman, J. Soc. Chem. Ind. Trans. 57 (1938) 225
52. Francisco J. Valdes-Parada, J. Alberto Ochoa-Tapia, Jose Alvarez-Ramirez .Validity of the permeability Carman_Kozeny equation: A volume averaging approach. J. Physica A, 388, (2009), pp.789-798
53. H. Jourde, P. Fenart, M. Vinches, S. Pistre, B. Vayssade. Relationship between the geometrical and structural properties of layered fractured rocks and their effective permeability tensor. A simulation study. Journal of hydrology, 32, 2007, p.117-132.
54. J. Ni, F. P. Incropera Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification—I. The conservation equations. Int. J. Heat Mass Transfer , vol. 38, no. 7, pp. 1271-1284, 1995
55. J. Ni, F. P. Incropera. Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification-II. Microscopic considerations. Int. J. Heat Mass Transfer , vol. 38, no. 7, pp. 1285-1296, 1995
56. Власюк М.П., Полежаев В.И. Естественная конвекция и перенос тепла в проницаемых пористых материалах. Институт прикладной математики АН СССР. Препринт N77, М., 1975.
57. Клейн И.С., Полежаев В.И. Конвективный теплообмен в проницаемых пористых средах. Институт проблем механики АН СССР. Препринт N111, М., 1978.
58. Т. А. Трифонова, М. А. Шеремет. Численные исследования нестационарных режимов сопряженной естественной конвекции в пористой цилиндрической области (модель Дарси–Буссинеска). Компьютерные исследования и моделирование, 2013, т. 5 № 2 с. 179–191

59. M.H. Pham, Y. Hua, N.B. Gray. Eddy Current Tomography for Metal Solidification Imaging. Proceedings of 1st World Congress on Industrial Process Tomography, Buxton, Greater Manchester 14–17 April 1999, pp.451-458.

Федюшкин Алексей Иванович

Моделирование гидродинамики и тепломассообмена при выращивании кристаллов с учетом прикристаллизационной (mushy) зоны без и с вибрационным воздействием на расплав. Обзор.



Подписано к печати 21.10.2014

Заказ № 27–2014

Тираж 30 экз.

Отпечатано в Федеральном Государственном Бюджетном Учреждении науки
Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, пр-т Вернадского, 101, корп.1