

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

В. П. Ильин, Л. В. Яушева
(Новосибирск)

В работах [1—4] построены и исследованы математические модели процесса направленной кристаллизации в одномерном приближении. Однако эти модели не объясняют такого явления, наблюдаемого экспериментально, как неоднородность распределения концентрации примеси по поперечному сечению слитка. Для выяснения структуры концентрационного профиля в данной работе рассматривается математическая модель процесса направленной кристаллизации в двумерном приближении с учетом диффузии в расплаве. Из интегральных соотношений баланса построены две разностные схемы и получены оценки погрешности разностных решений. На основе численных расчетов проведен анализ радиальной неоднородности для различных конфигураций фронта кристаллизации в зависимости от различных значений скорости кристаллизации v и равновесного коэффициента k_0 [5].

Предположим, что тепловые характеристики вещества мало зависят от концентрации примеси, а коэффициент диффузии — от температуры. Тогда задачу о перераспределении примеси можно рассматривать отдельно от тепловой задачи Стефана, предположив, что известна конфигурация фронта в каждый момент времени $z = z(r, t)$ и скорость перемещения v .

Рассмотрим слиток цилиндрической формы радиуса R и конечной длины L_s . Границу раздела двух фаз и краевые условия предполагаем симметричными относительно оси. Будем считать, что основным механизмом перемешивания в расплаве является диффузия. Тогда распределение концентрации примеси в области $z(r, t) < z < L_s$ ($0 < r < R$) подчиняется уравнению диффузии

$$(1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

и начальному условию

$$u(r, z, 0) = u_0 = \text{const.}$$

На боковой, торцевой поверхностях и оси симметрии задаем условие отсутствия потока

$$(2) \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$

В кристаллизующейся фазе при отсутствии диффузии концентрация примеси определяется из условия равновесия фаз на фронте

$$(3) \quad u_s(r, t, z(r, t)) = k_0 u(r, t, z(r, t)),$$

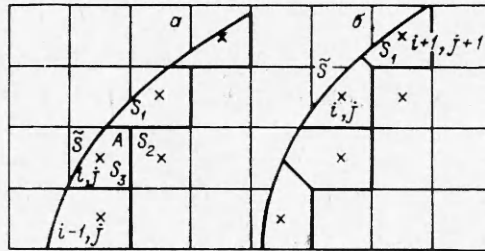
где k_0 — равновесный коэффициент распределения.

На поверхности фронта кристаллизации в силу неравновесных условий кристаллизации [5] имеем граничное условие

$$(4) \quad -D \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} + v_n (1 - k_0) u = 0,$$

где \mathbf{n} — внешняя нормаль к поверхности \bar{S} фронта кристаллизации; v_n — нормальная составляющая скорости.

Методы разностной аппроксимации рассматриваемых задач исследовались рядом авторов (см. [6] и цитируемую там литературу). В данной



Фиг. 1

работе рассматривается несколько отличный подход, основанный на аппроксимации балансных соотношений.

Введем по слитку равномерную неподвижную сетку $z_j = jhz + hz/2$, $r_i = ihr + hr/2$, $hr = R/(M + 1/2)$, $hz = L/(N + 1/2)$, где M , N — число точек по радиусу и длине слитка соответственно. Расчетная область будет при этом включать в себя внутренние ячейки и граничные, расположенные вдоль боковой, торцевой поверхности, оси симметрии и фронта кристаллизации.

Уравнение (1) проинтегрируем по ячейке $D_{i,j}$ на промежутке времени $(t_n, t_n + \tau)$, применим формулу Гаусса — Остроградского и в результате получим соотношение баланса

$$(5) \quad \iiint_{V_{i,j}(t_n+\tau)} [u(t_n + \tau) - u(t_n)] dV = \int_{t_n}^{t_n+\tau} dt \int_{S_{i,j}(t)} D \frac{\partial u}{\partial n} ds,$$

где $V_{i,j}(t)$ — объем; $S_{i,j}(t)$ — поверхность ячейки. Если узел сетки находится вблизи криволинейного фронта, используем два способа формирования ячеек в зависимости от расположения соседних узлов (фиг. 1, а, б). Неявная разностная схема, аппроксимирующая (5), имеет вид

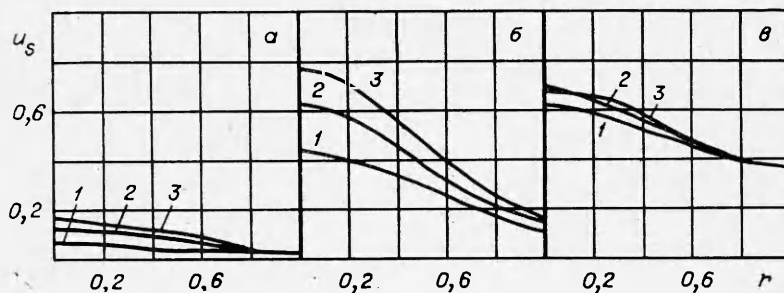
$$(6) \quad (y_{i,j}^{n+1} - y_{i,j}^n) V_{i,j}^{n+1} - \tau \sum_{k=1}^m \int_{S_k^{n+1}} \left[D \frac{\partial u}{\partial n} \right]^{n+1} ds = 0,$$

где S_k^{n+1} — одна из поверхностей вращения, образующих элементарную ячейку $D_{i,j}$; m — их число. Вблизи криволинейного фронта используем при этом первый способ формирования ячеек. Другая схема основана на явной аппроксимации диффузионных членов

$$(7) \quad (y_{i,j}^{n+1} - y_{i,j}^n) V_{i,j}^{n+1} - \tau \sum_{k=1}^m \int_{S_k^{n+1}} \left[D \frac{\partial u}{\partial n} \right]^n ds = 0$$

и использовании второго способа формирования ячеек вблизи криволинейного фронта. В формулах (6), (7) интегральные члены аппроксимируются конечными разностями первого порядка с учетом граничных условий (2)–(4).

Для обеих разностных схем можно показать, что погрешность аппроксимации разностных схем ψ_h удовлетворяет соотношению $|\psi_h| < C_0 h^2$,



Фиг. 2

где $h = \max \{hr, hz, \tau\}$; C_0 — некоторая константа. При выполнении условий

$$(8) \quad l_n < \frac{D}{v_n |1 - k_0|} \quad \text{общее для обеих схем;}$$

$$(9) \quad V_{i,j} > \frac{\tau D}{l_n} \frac{\tilde{S}_{i,j} (1 - \alpha)}{\alpha} \quad \text{для (6);}$$

$$(10) \quad V_{i,j} > \tau D \left\{ \sum_{k=1}^{m-1} \frac{S_k}{l_k} + \frac{\tilde{S}_{i,j} (1 - \alpha)}{l_n \alpha} \right\} \quad \text{для (7),}$$

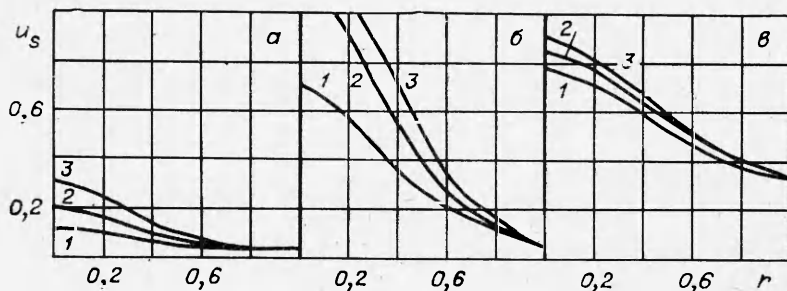
где $\alpha = 1 - v_n l_n (1 - k_0) / D$; $S_k, \tilde{S}_{i,j}$ — площади поверхностей S_k^{n+1} ; l_k, l_n — расстояние по нормали, на основе принципа максимума можно получить [6], что погрешность разностного решения $z_{i,j}^n = \bar{u}_{i,j}^n - u_{i,j}^n$ при $0 < t < L_s / v$ для обеих схем удовлетворяет оценке $\max_{i,j,n} |z_{i,j}^n| < C_1 h$,

где C_1 — некоторая константа.

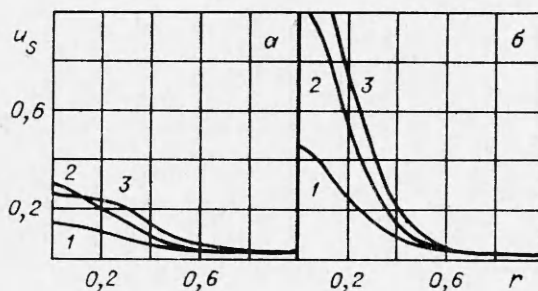
Для решения (6) применяем итерационный метод верхней релаксации с прогонками на линиях r_i [6]. Можно проверить, что при условиях (8)–(10) схемы (6), (7) будут устойчивыми.

С целью апробирования алгоритмов в случае плоского фронта проведены методические расчеты по неявной схеме при следующих исходных данных: $L_s = 10$ см, $R = 1$ см, $D = 0,1$ см²/ч, $v = 0,1$ см/ч, $k_0 = 0,1$, $M = 20$.

Число точек по длине слитка N бралось равным 100, 200, а значения временного шага $\tau = 0,125; 0,5; 1,0$. Эксперименты показали, что изменение шага hz дает незначительное отличие результатов (порядка 0,1%). Более существенным было влияние изменения шага по времени. Уменьшение τ приводит к уменьшению числа итераций и изменению результатов приблизительно на один процент. Отметим, что пробные расчеты по неяв-



Фиг. 3



Фиг. 4

ной схеме при несколько большем времени счета давали примерно одинаковые результаты с явной схемой.

Расчет процессов с криволинейным фронтом для исследования радиальной неоднородности проводился по явной схеме, при этом форма фронта задавалась параболой $z = z_0 r^2 + vt - z_0(3R/4)^2$ при значениях неизменяемых параметров: $L_s = 4$ см, $R = 1$ см, $D = 0,1$ см²/ч, $M = 20$, $N = 100$. Значения других параметров менялись следующим образом: равновесный коэффициент $k_0 = 0,01; 0,1; 0,5$, скорость кристаллизации $v = 0,5$ и 1 см/ч, параметр кривизны фронта $z_0 = 0,5; 1,0; 1,5$.

На фиг. 2—4 представлены соответственно для указанных значений z_0 кривые 1—3 зависимости концентрации примеси от радиуса r для сечений $z = 0,6; 1,56; 2,36$.

Как видно из результатов, увеличение кривизны фронта приводит к повышению неоднородности, примесь концентрируется в центре слитка, а на участках, удаленных от оси симметрии, концентрация близка к равновесному значению. Повышение скорости кристаллизации (см. фиг. 4, а, б — $v = 0,5$ и 1 см/ч соответственно) приводит также к увеличению радиальной неоднородности. Распределение примеси в зависимости от значений равновесного коэффициента k_0 является немонотонной функцией. Эффект радиальной неоднородности слабо проявляется при $k_0 = 0,01$ (фиг. 2, а, 3, а, 4, а) и наиболее выражен при $k_0 = 0,1$ (фиг. 2, б, 3, б). Дальнейшее увеличение равновесного коэффициента ($k_0 = 0,5$ — фиг. 2, в, 3, в) ослабляет неоднородность. Качественно это согласуется с экспериментом [7].

Поступила 9 X 1977

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау А. И. Влияние диффузии примесей в кристалле при направленной кристаллизации. — В кн.: Рост кристаллов. Т. 1. М., «Наука», 1967.
2. Демченко В. Ф., Козлитина С. С. Численное решение задачи диффузии в двухфазной среде с движущейся границей раздела фаз. — «Инж.-физ. журн.», 1968, т. 25, с. 693.
3. Кудрин В. Д., Яшуева Л. В. Численный метод решения задач направленной кристаллизации. — В кн.: Математ. пробл. химии. Ч. 1. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1973.
4. Ильин В. П., Яшуева Л. В. О численном решении задачи направленной кристаллизации. — В кн.: Математ. пробл. химии. Ч. 1. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1975.
5. Баргон, Прим, Слехтер. Распределение примеси в кристаллах из расплава. — В кн.: Германий. М., ИЛ, 1955.
6. Ильин В. П. Разностные методы решения эллиптических уравнений. Новосибирск, изд. Новосиб. ун-та, 1970.
7. Киргинцев А. И., Исаенко Л. И., Исаенко В. А. Распределение примесей при направленной кристаллизации. Новосибирск, «Наука», 1977.