

УДК 536.24-464, 536.252

А. П. Шпак<sup>1</sup>, Ю. П. Ладиков-Роев<sup>2</sup>, П. П. Рабочий<sup>2</sup>,  
Н. Н. Сальников<sup>2</sup>, О. К. Черемных<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України, Київ

<sup>2</sup>Інститут космічних досліджень Національної академії наук України  
і Національного космічного агентства України, Київ

## Исследование стационарных режимов в установке кристаллизации по методу Бриджмена

Досліджуються стаціонарні вісесиметричні процеси тепло- та масопереносу у розплаві зразка в установці Бріджмена. Для випадку великих чисел Прандтля аналітично показана відсутність стаціонарного режиму через нестійкість отриманого стаціонарного рішення. Для скінченних чисел Прандтля проведено чисельний аналіз. Наводиться вигляд відповідних стаціонарних гідродинамічних та теплових полів.

### ВВЕДЕНИЕ

Процессы кристаллизации в условиях микрогравитации в последнее время являются объектом исследований на Международной космической станции. Экспериментальные исследования осуществляются, в частности, в установках кристаллизации по методу Бриджмена [5, 7, 8], где процесс кристаллизации осуществляется в цилиндрической ампуле, которая перемещается из зоны нагревателя в зону холодильника. (Схема установки изображена на рис. 1). При этом часть вещества находится в ампуле в виде расплава. Гидродинамические процессы, происходящие в расплаве, определяют поток примесей на фронт кристаллизации, что в конечном итоге определяет качество кристалла. Поэтому представляют практический интерес задачи исследования таких процессов, а также и механизмов управления ими для целенаправленного влияния на процесс кристаллизации.

В данной работе исследуется проблема осесимметричных стационарных конвективных и тепловых режимов в установках кристаллизации по методу Бриджмена.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Считаем, что расплавленное вещество заполняет часть ампулы от верхнего теплоизолированного торца до фронта кристаллизации с температурой  $T_c$ . Ампула имеет форму цилиндра радиуса  $R_0$ . Свяжем с ампулой цилиндрическую систему координат, начало которой поместим на оси ампулы на одном из торцов цилиндра, а ось  $z$  направим вдоль оси цилиндра. Считаем, что ампула находится в однородном поле силы тяжести, при этом ось ампулы  $z$  параллельна силе тяжести, но направлена противоположно ей. На боковой поверхности ампулы температура изменяется линейно от  $T_c$  до  $T_h$ ,  $T_c < T_h$ . Вещество расплава считаем несжимаемым. Для удобства расчетов введем безразмерные переменные для длины, времени, скорости и температуры:

$$\begin{aligned} r &\longrightarrow \frac{r}{R_0}, & t &\longrightarrow \frac{tv}{R_0}, \\ v &\longrightarrow \frac{vR_0}{\nu}, & \theta &\longrightarrow \frac{T - T_c}{T_h - T_c}. \end{aligned}$$

В этих переменных уравнения Буссинеска [1, 3],

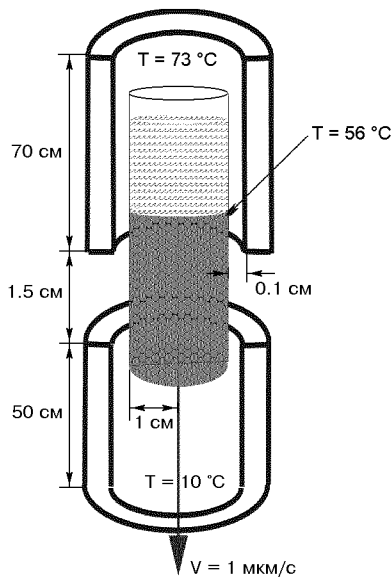


Рис. 1. Схема установки кристаллизации по методу Бриджмена

описывающие процессы тепло- и массопереноса в расплаве, имеют вид

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \times \text{rot} \mathbf{v} = - \text{grad} \left( \frac{p}{\rho_0} + \frac{v^2}{2} \right) + Gr \theta \mathbf{y} + \Delta \mathbf{v}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad} \theta = \frac{1}{Pr} \Delta \theta, \quad (2)$$

$$\text{div} \mathbf{v} = 0, \quad (3)$$

где  $\rho_0$  — плотность расплава, соответствующая температуре  $T = (T_c + T_h)/2$ ,  $p$  — отклонение давления от гидростатического,  $Gr = g \beta R_0^3 (T_h - T_c) / \nu^2$  — число Грасгофа,  $\beta = - (1/\rho_0) / (\partial \rho / \partial T)$  — коэффициент термического расширения жидкости,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\nu$  — кинематическая вязкость расплава,  $Pr = \nu / a$  — число Прандтля,  $a$  — коэффициент температуропроводности.

Для гидродинамической скорости расплава справедливы условия «прилипания» к поверхности ампулы:

$$\mathbf{v}|_{r=1} = \mathbf{v}|_{z=0} = \mathbf{v}|_{z=L_0} = 0, \quad (4)$$

где  $L_0$  — безразмерная высота ампулы ( $L_0 \rightarrow L_0/R_0$ ).

Граничные условия для температуры  $\theta$  имеют вид

$$\begin{aligned} \theta|_{z=0} &= 0, \\ (\text{grad} \theta)_n|_{z=L_0} &= \frac{\partial \theta}{\partial z}|_{z=L_0} = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\theta|_{r=1} = m \frac{z}{L},$$

где  $L = mL_0$ ,  $m = \text{const}$ .

В силу осевой симметрии для составляющих скорости  $v_r$  и  $v_z$ , а также для радиального градиента температуры  $\text{grad}_r \theta$  должны выполняться равенства

$$v_r|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial v_z}{\partial r}|_{r=0} = 0, \quad \text{grad}_r \theta|_{r=0} = 0. \quad (6)$$

Таким образом, задача нахождения стационарных решений свелась к решению уравнений тепло- и массопереноса (1)—(3) с граничными условиями (4)—(6).

#### ПРИБЛИЖЕННОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Для рассматриваемого двумерного случая осесимметричных движений удовлетворяющие уравнению (3) составляющие скорости  $v_r$  и  $v_z$  могут быть представлены в следующем виде:

$$v_r = - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad v_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad (7)$$

где  $\psi(r, z, t)$  — функция тока. Из граничных условий для скорости (4) и (6) следует, что на поверхности ампулы  $\Gamma$  функция  $\psi(t, r, z)$  постоянна. Поэтому без ограничения общности можно положить  $\psi|_{\Gamma} = 0$ .

Подставляя (7) в уравнение теплопроводности (2), получаем

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{r} \{ \psi, \theta \} = \varepsilon^2 \left[ \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right], \quad (8)$$

где

$$\{ \psi, \theta \} = \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \theta}{\partial z} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial r}$$

— скобка Пуассона,  $\varepsilon = 1/\sqrt{Gr}$ . Для нахождения решения уравнений (1) и (8) ограничимся рассмотрением случая больших чисел Прандтля, когда  $\varepsilon \ll 1$ . Этот случай соответствует малому значению коэффициента температуропроводности  $a$ , что в свою очередь означает, что теплообмен во внутренней части объема ампулы осуществляется посредством конвекции. И только в пограничном слое, где скорости расплава малы, доминирующую роль играет процесс диффузии тепла. Для получения приближенного стационарного решения уравнения (8) воспользуемся методом возмущений. Разлагая (8) в ряд по  $\varepsilon$  в основном объеме и в пограничном слое и сшивая найденные в этих областях решения, получаем, что приближенное решение для температуры, удовлетворяющее граничным условиям (5), (6), имеет вид

$$\theta = B(t)F(r, z), \quad (9)$$

где

$$F(r, z) = \varphi + M(r) \left[ 1 + \frac{1}{\varepsilon} (r - 1) \right] \frac{z}{L}, \quad (10)$$

$$\varphi(r, z) = r^2(1 - r^2) \sin^2 \frac{\pi z}{L},$$

$$M(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq 1 - \varepsilon, \\ m, & 1 - \varepsilon \leq r \leq 1, \end{cases}$$

а функция  $B(t)$  произвольна.

Легко убедиться, что согласованное с (9) решение для скорости, удовлетворяющее граничным условиям, имеет вид

$$\mathbf{v} = A(t)\mathbf{u}, \quad (11)$$

где компоненты  $u_r$  и  $u_z$  вектора  $\mathbf{u} = (u_r, 0, u_z)$  определяются следующими выражениями:

$$u_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad u_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r}. \quad (12)$$

Для нахождения неизвестных функций  $A(t)$  и  $B(t)$  используем метод Бубнова—Галеркина. Следуя этому методу (см. подробнее [1, 6]), для функций  $A(t)$  и  $B(t)$  получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} S \frac{dB}{dt} + A(t)B(t) - \varepsilon^2 B(t)Q &= 0, \\ U \frac{dA}{dt} + B(t)GrW - A(t)Y &= 0, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} S &= \int_{\mathbf{v}} F^2 r dr dz = \frac{L}{3360} - \frac{m^2 L}{9} \varepsilon + O(\varepsilon^2), \\ X &= \int_{\mathbf{v}} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} \frac{\partial F}{\partial z} - \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial F}{\partial r} \right) F r dr dz = \\ &= -\frac{m^2}{120} \varepsilon^2 + O(\varepsilon^4), \\ Q &= \int_{\mathbf{v}} F \Delta F r dr dz = \\ &= \frac{m^2 L}{6} - \frac{L}{280} - \frac{\pi^2}{2520 L} + \frac{mL}{4} \varepsilon + O(\varepsilon^2), \\ U &= \int_{\mathbf{v}} \frac{1}{r^2} \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right] r dr dz = \frac{\pi^2}{560 L} + \frac{L}{40}, \\ W &= \int_{\mathbf{v}} (\text{rot } \mathbf{u})^2 r dr dz = \frac{\pi^2}{15 L} + \frac{\pi^4}{140 L^3} + \frac{3L}{4}, \\ Y &= \int_{\mathbf{v}} \frac{\partial \varphi}{\partial r} F r dr dz = -\frac{mL}{12} \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3). \end{aligned} \quad (14)$$

Используя обозначения

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{Y}{U} = -\frac{140mL^2}{3\pi^2 + 42L^2} \varepsilon^2, \\ a_2 &= \frac{W}{U} = \frac{112\pi^2 L^2 + 12\pi^4 + 1260L^4}{3\pi^2 L^2 + 42L^4}, \\ b_1 &= \frac{X}{S} = -\frac{84m^2 \varepsilon^3}{3L - 1120m^2 L \varepsilon}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$b_2 = \frac{Q}{S} = \frac{420m^2 L^2 - 9L^2 - \pi^2 + 630mL\varepsilon}{0.75L^2 - 280m^2 L^2 \varepsilon},$$

Перепишем систему (13) в виде

$$\begin{aligned} \frac{dB}{dt} + b_1 A(t)B(t) - \varepsilon^2 b_2 B(t) &= 0, \\ \frac{dA}{dt} - a_1 GrB(t) - a_2 A(t) &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Легко видеть, что система (16) имеет искомое стационарное решение при

$$A_0 = \varepsilon^2 \frac{b_2}{b_1}, \quad B_0 = -\varepsilon^2 \frac{b_2 a_2}{b_1 a_1 Gr}. \quad (17)$$

#### ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ

Исследуем найденное решение на устойчивость, используя метод малых возмущений. Рассмотрим малые возмущения стационарного состояния в виде

$$\begin{aligned} B(t) &= B_0 + x_0 e^{\lambda t}, \\ A(t) &= A_0 + y_0 e^{\lambda t}, \end{aligned} \quad (18)$$

где  $x_0$  и  $y_0$  — малые величины. Подставляя (18) в (16) и линеаризуя полученные уравнения по малости  $x_0$  и  $y_0$ , получаем

$$\begin{aligned} \lambda x_0 + b_1(A_0 x_0 + B_0 y_0) - \varepsilon^2 b_2 x_0 &= 0, \\ \lambda y_0 - a_1 Gr x_0 - a_2 y_0 &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Эта система будет иметь нетривиальное решение  $x_0$  и  $y_0$ , если ее определитель равен нулю. Откуда находим

$$\lambda_{1,2} = \frac{a_2 \pm \sqrt{a_2^2 + 4\varepsilon^2 a_2 b_2}}{2}. \quad (20)$$

Из уравнения (20) видно, что одно из значений  $\lambda$  будет положительно при любых параметрах системы. Последнее означает, что найденное стационарное решение (9), (11), (17) системы (16) неустойчиво. При этом, как следует из (15), с увеличением  $m$  (т. е. с увеличением градиента температуры на боковой границе ампулы)  $\lambda$  увеличивается, и неустойчивость развивается быстрее.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ

Полученные в предыдущих двух разделах результаты справедливы при больших числах Прандтля. С точки зрения практических приложений, однако, более интересен случай  $Pr \leq 1$ , который соответствует большинству используемых веществ в установках кристаллизации по методу Бриджмена. Поскольку получение аналитических результатов при таких значениях числа Прандтля затруднительно, то в данном разделе приводятся результаты числен-

ных расчетов уравнений массо- и теплопереноса в расплаве. Для получения численного решения перейдем в системе (1)–(3) к переменным «вихрь ( $\omega$ ) — функция тока ( $\psi$ )» [2], в которых указанная система имеет вид

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \{ \psi, \omega \} = \frac{1}{r} Gr \frac{\partial \theta}{\partial r} + \Delta \omega, \quad (21)$$

$$\omega = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r^3} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \quad (22)$$

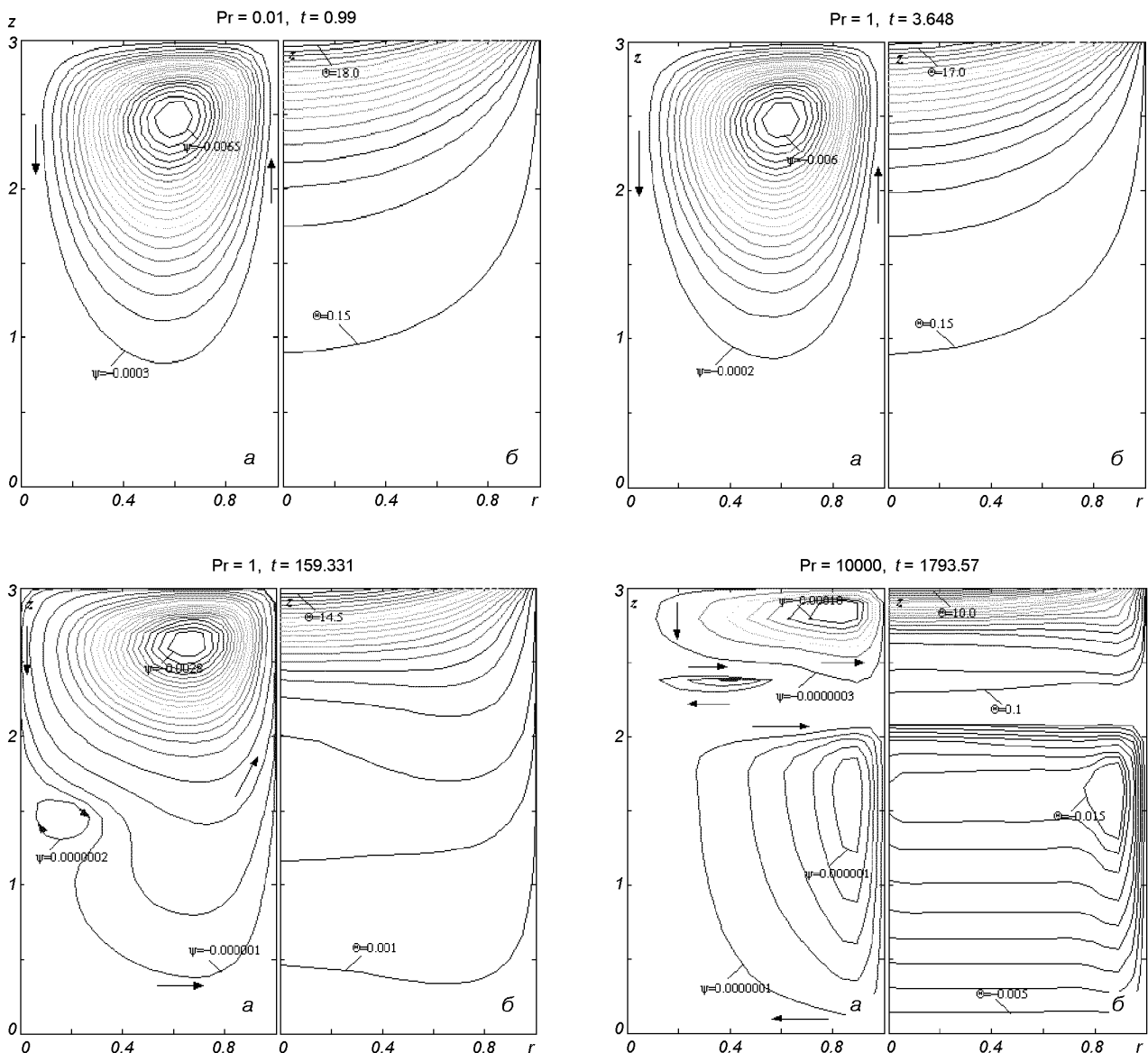


Рис. 2 Стационарные распределения линий тока (а) и изотерм (б) при различных значениях числа Pr

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{r} \{\psi, \theta\} = \frac{1}{Pr} \Delta \theta, \quad (23)$$

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Граничные условия (4)—(6) в новых переменных примут вид

$r = 0$ :

$$\omega = 0, \quad \psi = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial r} = \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0;$$

$r = 1$ :

$$\omega = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}, \quad \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \quad \theta = m \frac{z}{L},$$

$z = 0$ :

$$\omega = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \quad \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0, \quad \theta = 0;$$

$z = L$ :

$$\omega = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \quad \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0.$$

На рис. 2 представлены стационарные распределения линий тока и изотерм при различных значениях числа  $Pr$ , на которые выходят с течением времени указанные величины, полученные путем численного решения уравнений (21)—(23) с граничными условиями (24). Уравнения решались методом установления с использованием неявной продольно-поперечной схемы [4], построенной на равномерной сетке. В качестве критерия установления стационарного режима использовалось условие

$$\max_{ij} |\xi_{ij}^{n+1} - \xi_{ij}^n| < \eta,$$

где  $\xi = \{\psi, \theta, \omega\}$ ,  $n$  — номер временного слоя,  $\eta$  — малая величина, которую можно варьировать (при расчетах использовалось значение  $\eta = 10^{-10}$ ). Для аппроксимации уравнений системы разностными уравнениями входящие в нее пространственные производные заменялись центральными, а производные по времени — правыми разностными производными. Решение системы разностных уравнений на каждом временном слое находилось методом прогонки. Расчеты проводились для следующих интервалов значений безразмерных параметров:

$$10 < Gr < 10^6, \quad 10^{-2} < Pr < 10^4.$$

Результаты численного решения показывают, что поля гидродинамических скоростей и температурные поля в стационарном режиме определяются

величиной  $Pr$ , а величина  $Gr$  влияет только на интенсивность стационарных конвективных течений. При достаточно больших числах Прандтля (конкретное значение  $Pr$  определяется величиной числа Грасгофа) численные стационарные решения получить не удастся. Это, по-видимому, объясняется быстро развивающейся неустойчивостью таких решений, что хорошо согласуется с полученным выше аналитическим результатом. При этом с увеличением  $Gr$  величина  $Pr$ , при которой перестает достигаться стационарный режим, смещается в сторону меньших чисел Прандтля. Как видно из рисунков, при больших числах Прандтля форма изотерм подобна форме линий тока, что оправдывает выбор ранее исследовавшихся аналитически пробных функций (см. (12)). При фиксированном  $Gr$  время установления стационарного режима с увеличением числа Прандтля увеличивается.

На всех рисунках слева приведены линии тока, а справа — изотермы,  $\Theta = ((mz)/L - \theta)Gr$ ,  $t$  — безразмерное время установления стационарного режима,  $Gr = 100$ ,  $L = 3.0$ .

#### ВЫВОДЫ

Таким образом, величина числа Прандтля определяет тепло- и массоперенос в расплавленном веществе в установке Бриджмена. В некоторых случаях (при  $Pr \gg 1$ ) в расплаве не может установиться стационарный режим. Этот результат, по нашему мнению, является неожиданным и требует дальнейшего экспериментального и теоретического исследования.

Авторы благодарят В. М. Кунцевича и О. П. Федорова за плодотворное обсуждение результатов работы. Статья выполнена в рамках контракта «МКС—Анализ» с Национальным космическим агентством Украины.

1. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. — М.: Наука, 1972.—392 с.
2. Долгих Г. А., Феоничев А. И. Численное исследование процессов тепло- и массообмена при направленной кристаллизации в условиях невесомости // Проблемы механики и теплообмена в космической технике. — М.: Машиностроение, 1982.
3. Земсков В. С. Новые научные представления о процессах, сопровождающих направленную кристаллизацию расплавов, — итог экспериментов по выращиванию кристаллов полупроводников на космических аппаратах // Сб. тр. VII Российского симп. «Механика невесомости. Итоги и перспективы фундаментальных исследований гравитационно-чувствительных систем» (Москва, 11—14 апреля 2000 г.). — М.: ИПМ РАН, 2001.—С. 34—51.

4. Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.
5. Современная кристаллография: В 4-х томах. Том 3. Образование кристаллов / Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Богдарасов Х. С. и др. — М.: Наука, 1980.—408 с.
6. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. — М.: Мир.—1988.—352 с.
7. Шпак А. П., Федоров О. П., Берсудский Е. И., Живолуб Е. Л. Некоторые проблемы исследования процессов направленного затвердевания в условиях микрогравитации(создание установки МОРФОС) // Космічна наука і технологія.—2002.—8, № 5/6.—С. 19—27.
8. Flemings M. Solidification Processing. — N. Y., 1974.—354 p.

**THE INVESTIGATION OF STATIONARY REGIMES  
IN A CRYSTALLIZATION SETUP WITH THE USE  
OF THE BRIDGEMAN METHOD**

**A. P. Shpak, Yu. P. Ladikov-Roev, P. P. Rabochii,  
N. N. Salnikov, and O. K. Cheremnykh**

Some stationary axisymmetric processes of heat and mass transfer in a melt in the Bridgeman crystallization setup are investigated. The absence of stationary regime due to the instability of the stationary solution obtained was shown for large Prandtle numbers. For finitesimal Prandtle numbers, a numerical analysis was made. The view of the corresponding stationary fluid and heat fields is presented.