

Разработка

«Программное обеспечение для расчета скорости и формы сечения жидких цилиндрических включений, мигрирующих перпендикулярно плотноупакованным плоскостям неоднородно нагретого кристалла в стационарных тепловых условиях»

Авторы разработки:

доцент кафедры технической физики ЮФУ, к.ф.-м.н. Гармашов С.И.

доцент кафедры технической физики ЮФУ, к.ф.-м.н. Гершанов В.Ю.

1. Назначение разработки и область применения

Разработка представляет собой компьютерную программу (в дальнейшем – Программа) под названием *«Программное обеспечение для расчета скорости и формы сечения жидких цилиндрических включений, мигрирующих перпендикулярно плотноупакованным плоскостям неоднородно нагретого кристалла в стационарных тепловых условиях»*.

Программа предназначена для расчета и исследования зависимостей скорости и формы сечения жидкого цилиндрического включения, мигрирующего в кристалле под действием постоянного градиента температуры, от параметров, характеризующих рассматриваемую раствор-расплавную систему и массоперенос, возникающий в ней в условиях неоднородного стационарного нагрева.

Программа может быть использована в научно-исследовательской работе при изучении влияния межфазной кинетики и удельной межфазной поверхностной энергии и ее анизотропии на форму сечения цилиндрических включений и скорость их миграции, а также при анализе экспериментальных данных по миграции цилиндрических включений в неоднородно нагретом кристалле в стационарных тепловых условиях.

Программа может быть рекомендована в качестве демонстрационного средства при чтении лекций по таким дисциплинам как «Физика процессов кристаллизации», «Процессы микро- и нанотехнологий», «Физика конденсированного состояния», а также в качестве обучающего средства при самостоятельном изучении студентом соответствующих дисциплин.

Расчет скорости и формы сечения жидкого цилиндрического включения в Программе осуществляется путем численного решения системы нелинейных уравнений, составленной из условия постоянства потока вещества кристалла в жидкой фазе в установившемся режиме миграции включения с учетом капиллярных эффектов на межфазной границе.

При разработке Программы сделаны следующие допущения.

Предполагается, что жидкое включение цилиндрической формы находится в пластине, вырезанной из кристалла вдоль одной из его плотноупакованных плоскостей, причем ось включения параллельна поверхностям пластины. Считается, что пластина состоит из вещества А, а включение жидкой фазы представляет собой раствор вещества А в расплаве вещества В (рис. 1).

Тепловой режим процесса миграции удовлетворяет следующим условиям:

- в пластине существует градиент температуры, перпендикулярный сингулярным участкам межфазной границы;
- теплопроводности кристаллической пластины и жидкого включения одинаковы, так что поле градиента температуры однородно по толщине пластины;
- колебания температуры в пластине отсутствуют.

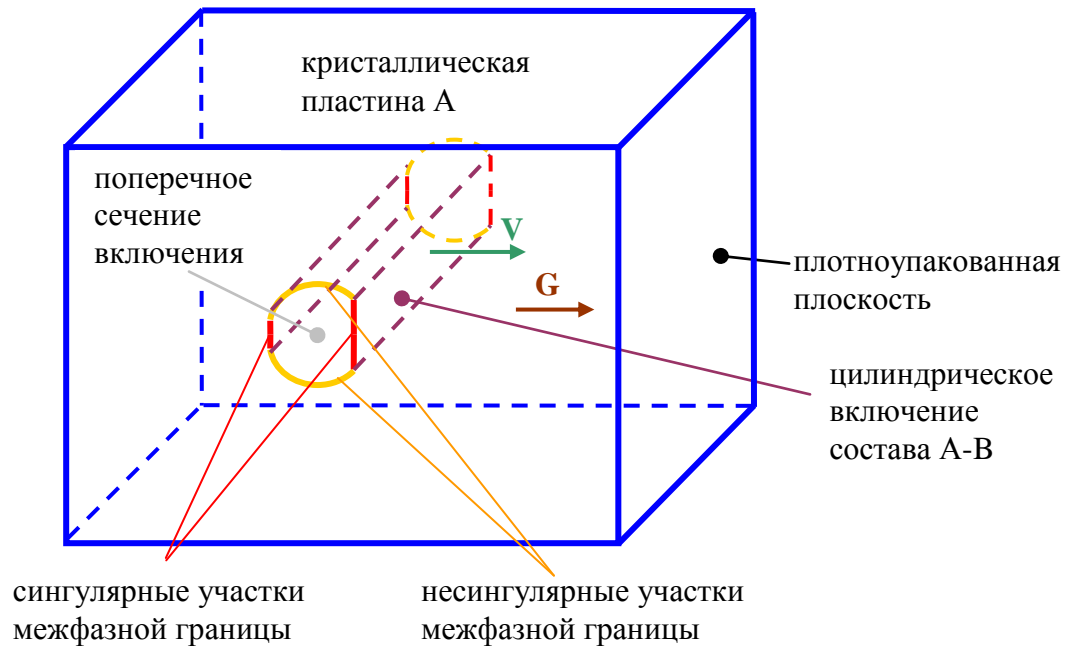


Рисунок 1. Схематическое изображение жидкого цилиндрического включения состава А-В, мигрирующего со скоростью V в кристаллической пластине А под действием градиента температуры G .

Предполагается, что массоперенос в жидкой фазе имеет исключительно диффузионный характер, а фазовая диаграмма системы А-В является простой эвтектической. Удельная межфазная поверхностная энергия считается одинаковой для всех участков межфазной границы за исключением тех, которые параллельны плотноупакованным плоскостям и поэтому характеризуются меньшим значением удельной поверхностной энергии. В таком случае межфазная граница имеет участки двух типов - криволинейные (несингулярные) с поверхностной энергией γ_{ns} и плоские (сингулярные) с поверхностной энергией $\gamma_s < \gamma_{ns}$ (рис. 1).

Предполагается, что межфазные процессы на несингулярных (атомно-шероховатых) участках межфазной границы протекают по нормальному механизму при малых пересыщениях (недосыщениях), не влияющих на распределение компонентов внутри включения, а на

сингулярных (атомно-гладких) участках - в соответствии с одним из послойных механизмов роста (растворения) - дислокационным или зародышевым. Для первого из них связь между скоростью V движения межфазной границы и действующим на ней пересыщением (недосыщением) ΔC_s выражается в виде:

$$V = \mu_{c(d)} \Delta C_s^2,$$

а для второго - в виде:

$$V = \mu'_{c(d)} \exp(-A_{c(d)} |\Delta C_s|^{-1}),$$

где $\mu_{c(d)}$, $\mu'_{c(d)}$, $A_{c(d)}$ - коэффициенты, характеризующие межфазную кинетику кристаллизации (растворения).

Интерфейс разработанной Программы представлен на рис. 2.

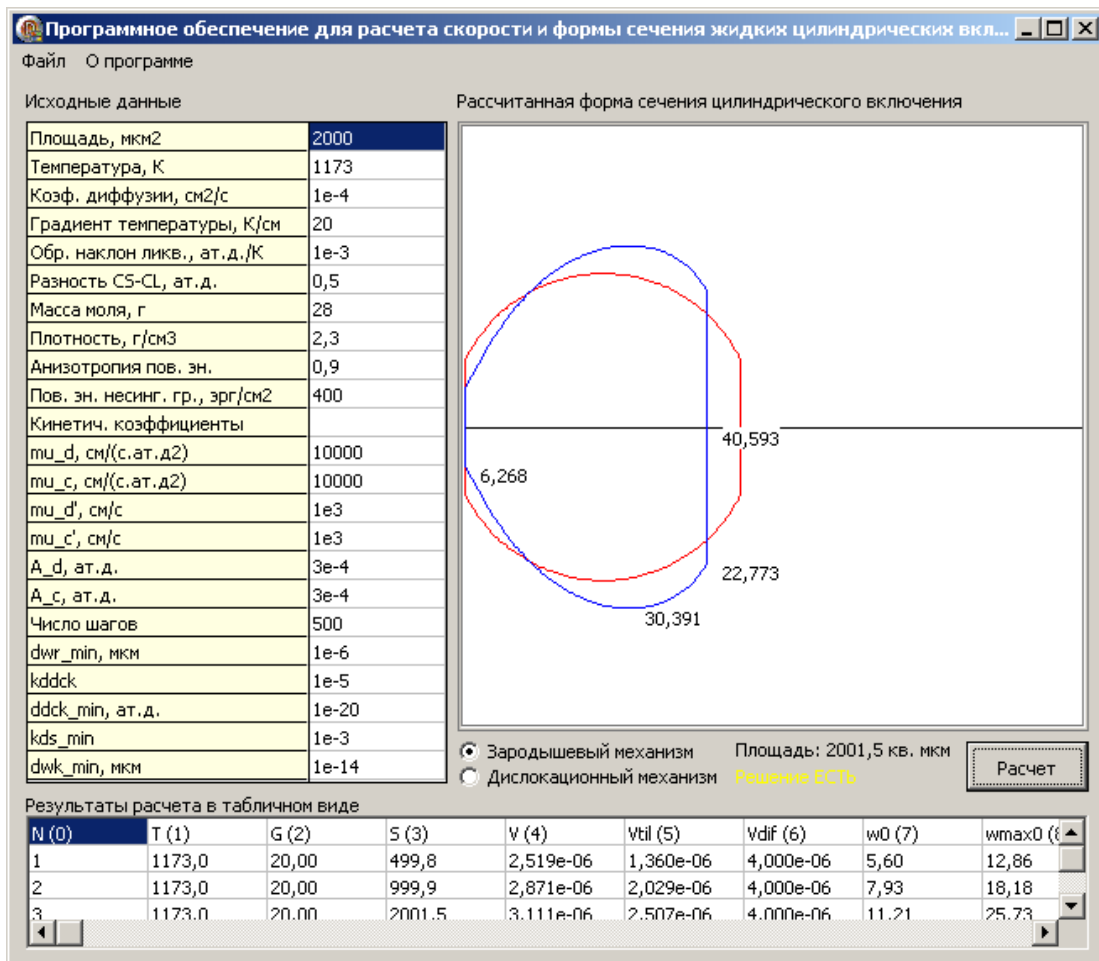


Рисунок 2. Интерфейс Программы.

Разработанная Программа позволяет:

- задавать значения исходных параметров задачи путем их ввода в таблицу, расположенную в левом верхнем углу интерфейса;
- задавать механизм межфазных процессов (зародышевый или дислокационный) при помощи переключателя, расположенного в центральной части интерфейса;
- по нажатию кнопки **Расчет** производить расчет скорости, равновесной и установившейся неравновесной формы поперечного сечения цилиндрического включения и отображать результаты расчета в графическом (справа вверху интерфейса Программы) и табличном (внизу интерфейса Программы) виде;
- сохранять исходные значения параметров задачи в файле с заданным пользователем именем (пункт меню **Файл / Сохранить исх. данные**);
- вводить исходные значения параметров задачи из файла с заданным именем (пункт меню **Файл / Открыть исх. данные**);
- сохранять результаты расчета в табличном виде в файле с заданным пользователем именем (пункт меню **Файл / Сохранить таблицу**);
- сохранять результаты расчета в графическом виде в файле с заданным пользователем именем (пункт меню **Файл / Сохранить форму**).

В программе предусмотрена возможность вызова модуля справки (пункт меню **Справка**), где представлена краткая инструкция по работе с Программой.

Программа разработана при поддержке Южного федерального университета (проект К-07-Т-39).

2. Используемые технические средства

Для использования компьютерной программы необходимо иметь компьютер с процессором Pentium IV (или последующие типы), объемом оперативной памяти не менее 512 Мб, операционной системой Windows XP (или последующие версии). Доступ в Интернет не требуется.

Компьютерная программа представляет собой исполняемый файл с именем **STM2D-K-StatShape.exe** и файл справки с именем **STM2D-K-StatShape-help.pdf**. Для своей работы программа не требует инсталляции: ее работа начинается сразу же после запуска на исполнение файла **STM2D-K-StatShape.exe**.

Информация о возможностях Программы и ссылка для получения ее демоверсии размещена на интернет-сайте Южного федерального университета "Учебно-методические разработки ЮФУ": <http://open-edu.sfedu.ru/>

Для работы с Программой рекомендуется предварительно ознакомиться со статьей [1] и справочной информацией к программе.

1. Garmashov, S.I. Velocity and Cross-Section Shape of Liquid Cylindrical Inclusions Migrating Normally to Close-Packed Planes of a Non-Uniformly Heated Crystal under Stationary Thermal Conditions / S.I. Garmashov, V.Yu. Gershanov // J. Cryst. Growth. - 2009. - V. 311, N. 2. - P. 413–419.

Для возможности открытия файла **STM2D-K-StatShape-help.pdf**, содержащего справочную информацию о порядке работе с программой, требуется наличие на компьютере установленной свободно распространяемой программы **Acrobat Reader**.

Информация для контактов с авторами программы

Адрес организации

344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, факультет физики, кафедра технической физики Южного федерального университета

Телефон кафедры (863)-297-51-27

Факс факультета (863)-297-51-20

Адреса электронной почты авторов

Гармашов Сергей Иванович garmashov@sfedu.ru

Гершанов Владимир Юрьевич yugershanov@sfedu.ru