

Разработка

**«Компьютерная программа «Модель эволюции формы сечения жидкого цилиндрического включения в неоднородно нагретом кристалле при пилообразных колебаниях температуры»**

**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 *«Модель эволюции формы сечения жидкого цилиндрического включения в неоднородно нагретом кристалле при пилообразных колебаниях температуры»*.

Программа предназначена для моделирования эволюции формы поперечного сечения жидкого цилиндрического включения в кристалле, возникающей в случае, если исходная форма сечения не соответствует заданным значениям градиента температуры, скоростей нагревания / охлаждения при пилообразных колебаниях температуры и других параметров рассматриваемой раствор-расплавной системы. При этом предполагается, что поле градиента температуры в кристалле и включении однородно.

Программа может быть использована в научно-исследовательской работе при изучении влияния межфазной кинетики, удельной межфазной поверхностной энергии и ее анизотропии, пилообразных колебаний температуры на эволюцию формы сечения цилиндрических включений и скорость их миграции (в случае отличного от нуля градиента температуры), а также при анализе экспериментальных данных по миграции цилиндрических включений в неоднородно нагретом кристалле в стационарных и нестационарных 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.

При разработке Программы сделаны следующие допущения.

Предполагается, что жидкое включение цилиндрической формы находится внутри кристаллической пластины, причем плоскость поверхности пластины и ось включения параллельны одной из плотноупакованных кристаллографических плоскостей. Считается, что пластина состоит из вещества А, а включение жидкой фазы представляет собой раствор вещества А в расплаве вещества В (рис. 1).

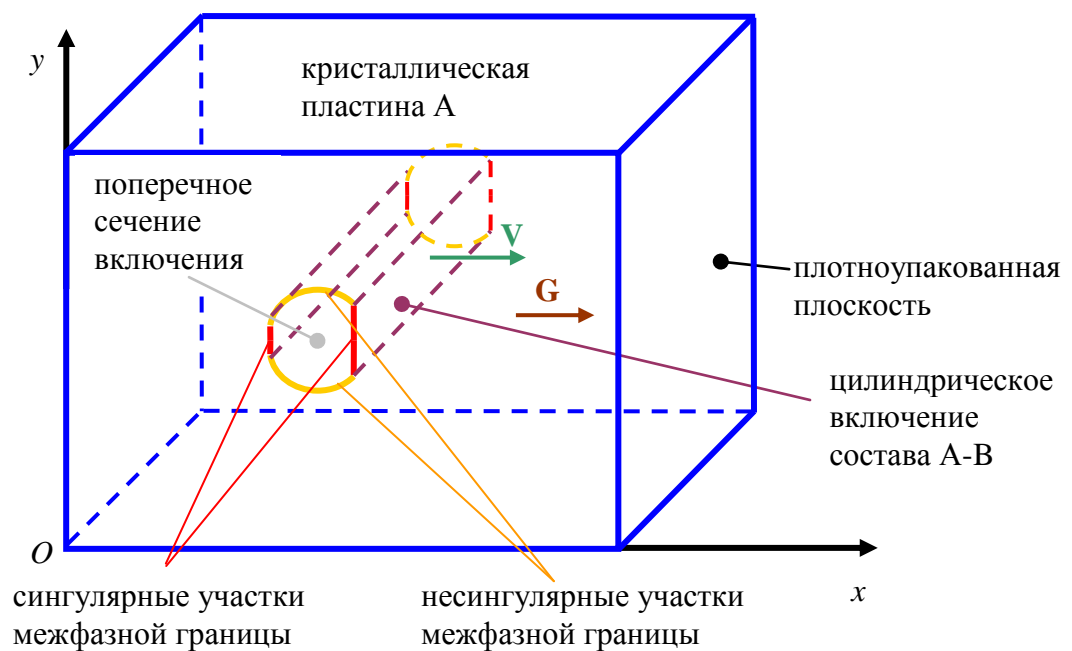


Рисунок 1. Схематическое изображение жидкого цилиндрического включения состава А-В, мигрирующего со скоростью  $V$  в кристаллической пластине А под действием градиента температуры  $G$

Предполагается, что граница включения (межфазная граница) имеет участки двух типов - криволинейные (несингулярные) и плоские (сингулярные, параллельные плотноупакованным плоскостям кристалла). Удельная межфазная поверхностная энергия для всех несингулярных участков межфазной границы считается одинаковой и равной  $\gamma_{ns}$ . Сингулярные участки межфазной границы характеризуются меньшей поверхностной энергией  $\gamma_s < \gamma_{ns}$  (рис. 1).

Теплоперенос в рассматриваемой системе удовлетворяет следующим условиям:

- в пластине существует градиент температуры, перпендикулярный сингулярным участкам межфазной границы;
- теплопроводности кристаллической пластины и жидкого включения одинаковы, т.е. поле градиента температуры считается строго однородным;
- колебания температуры в каждой точке межфазной границы происходят синфазно и имеют пилообразную форму с постоянными скоростями понижения и повышения температуры  $a_{c(h)}$ , причем в общем случае колебания температуры могут быть несимметричными, т.е.  $|a_c| \neq a_h$ ;
- длительности стадий повышения и понижения температуры при пилообразных колебаниях температуры  $\tau_{c(h)}$  много больше времени релаксации диффузии в объеме жидкой фазы.

При таких допущениях уравнение теплопереноса имеет простое аналитическое решение, соответствующее линейному распределению температуры  $T(x, y, t)$  по толщине пластины (вдоль оси  $Ox$ ) в произвольный момент времени  $t$ :  $T(x, y, t) = T(0,0,0) + Gx + \Delta T(t)$ , где  $G$  – градиент температуры, направление которого совпадает с осью  $Ox$ ,  $\Delta T(t)$  – функция, определяющая зависимость температуры от времени при ее пилообразных колебаниях.

Предполагается, что массоперенос в жидкой фазе имеет исключительно диффузионный характер, а фазовая диаграмма системы А-В является простой эвтектической.

Моделирование массопереноса в жидком включении и эволюции формы его сечения в Программе осуществляется путем численного решения двумерного нестационарного уравнения диффузии в криволинейной области с подвижными границами. При этом криволинейный (несингулярный) участок межфазной границы аппроксимируется набором прямолинейных участков (рис. 2).

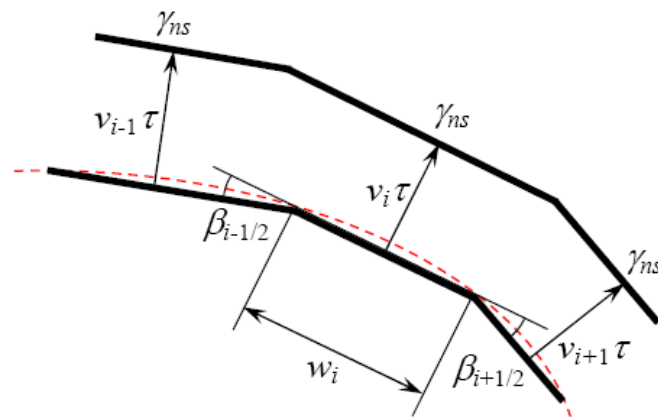


Рисунок 2. Аппроксимация криволинейной границы (штриховая линия) набором прямолинейных участков с удельными поверхностными энергиями  $\gamma_{ns}$  ( $w_i$  – ширина  $i$ -го участка,  $v_i$  – скорость его движения,  $\beta_{i\pm 1/2}$  – углы между  $i$ -м участком и двумя соседними участками)

Граничные условия для уравнения диффузии составляются в соответствии с действующими механизмами межфазных процессов. Предполагается, что межфазные процессы на несингулярных (атомно-шероховатых) участках межфазной границы протекают по нормальному механизму, при котором пересыщения (недосыщения) малы и не влияют на распределение компонентов в объеме жидкой фазы, 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)  $\Delta C_s$  выражается в виде:

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

а для второго – в виде:

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

где

$$\Delta C_s = C(\bar{x}, \bar{y}, t) - C^*(\bar{x}, \bar{y}, t), \quad C^*(\bar{x}, \bar{y}, t) = C^*(\bar{x}, \bar{y}, 0) + \Delta T(t)m^{-1},$$

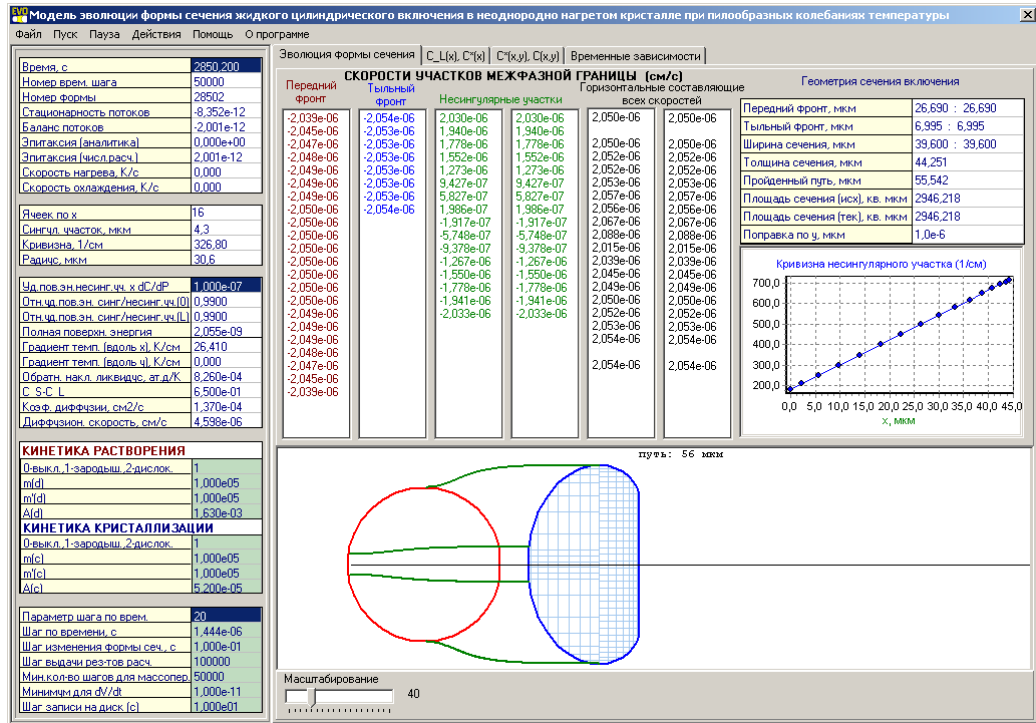
$\mu_{c(d)}$ ,  $\mu'_{c(d)}$ ,  $A_{c(d)}$  - коэффициенты, характеризующие межфазную кинетику кристаллизации (растворения);  $C(\bar{x}, \bar{y}, t)$ ,  $C^*(\bar{x}, \bar{y}, t)$  - фактическая и равновесная концентрации вещества А в растворе вещества В в точке межфазной границы с координатами  $(\bar{x}, \bar{y})$  в момент времени  $t$ ;  $m$  – наклон линии ликвидус для системы А-В.

Моделирование эволюции формы сечения включения в Программе осуществляется путем циклического повторения процедуры решения нестационарного уравнения диффузии для нахождения средних за период пилообразных колебаний температуры скоростей прямолинейных участков, аппроксимирующих границу включения, и процедуры построения новой формы сечения включения. Новая форма сечения включения строится путем параллельного переноса прямолинейных участков межфазной границы на расстояние, равное произведению нормальной скорости этих участков (средней за период колебаний температуры) на задаваемый временной шаг  $\tau$  (рис. 2), обеспечивающий необходимую точность моделирования.

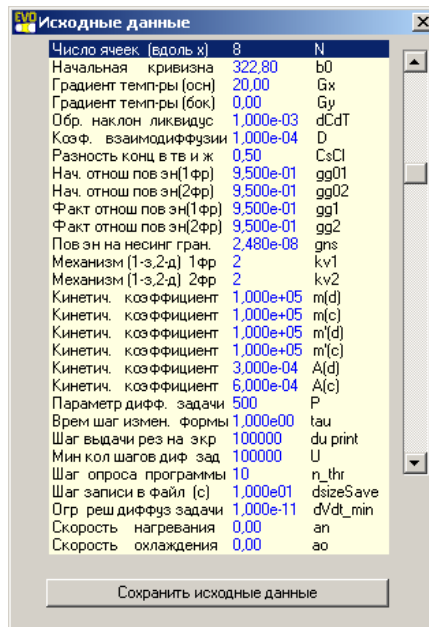
Для численного решения уравнения массопереноса используется неравномерная прямоугольная сетка, шаг которой определялся размерами прямолинейных участков, аппроксимирующих границу включения

(рис. 3, а). Решение уравнения массопереноса осуществляется методом конечных разностей по явной схеме.

Интерфейс разработанной Программы представлен на рис. 3.



а



б

Рисунок 3. Интерфейс Программы

(основная панель (а), панель для ввода исходных данных (б))

Разработанная Программа позволяет:

- задавать значения исходных параметров новой задачи с помощью слайдера на отдельной панели **«Исходные данные»** (рис. 3, б), вызываемом после выбора пункта меню **Файл / Новый** на основной панели (рис. 3, а);

- продолжать ранее начатый расчет путем открытия файла, в котором автоматически сохраняются текущие результаты расчета (пункт меню **Файл / Открыть...**);

- выполнять моделирование эволюции формы сечения включения после выбора пункта меню **Пуск**;

- отображать результаты расчета в табличном и графическом виде, а именно отображать:

- 1) таблицы с информацией о скоростях участков межфазной границы и текущих размерах сечения включения (в центральной и правой частях основной панели (рис. 3, а));
- 2) зависимость кривизны криволинейного участка межфазной границы от координаты (в правой части основной панели (рис. 3, а));
- 3) исходную и текущую формы сечения включения (в нижней части основной панели (рис. 3, а));
- 4) зависимость ликвидусных (зеленый цвет) и равновесных (красный цвет) концентраций вдоль межфазной границы от координаты  $x$  (закладка **«C\_L(x), C\*(x)»**, рис. 4);
- 5) двумерное распределение равновесных концентраций вдоль межфазной границы (красные линии) и фактических концентраций в жидкой фазе (синие линии) (закладка **«C\*(x,y), C(x,y)»**, рис. 5).
- б) временные зависимости скорости включения, размеров его сечения и пройденного пути (закладка **«Временные зависимости»**, рис. 6).

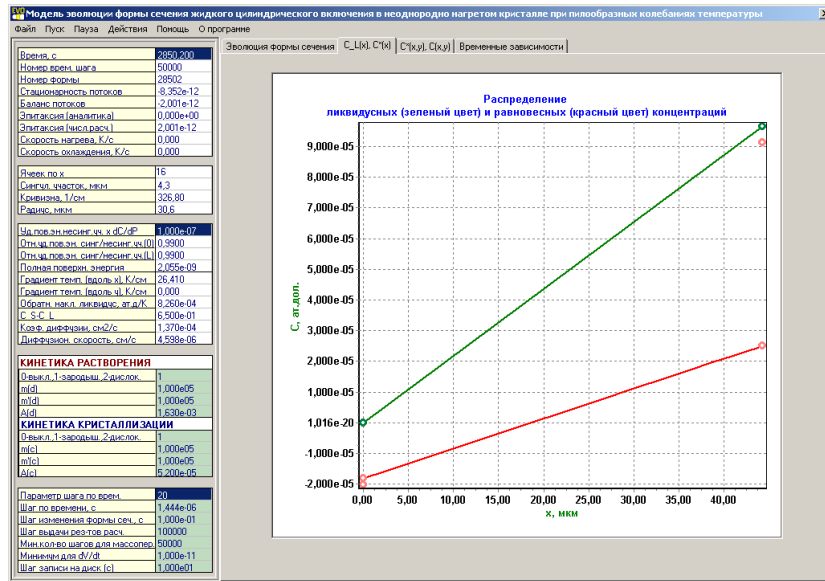
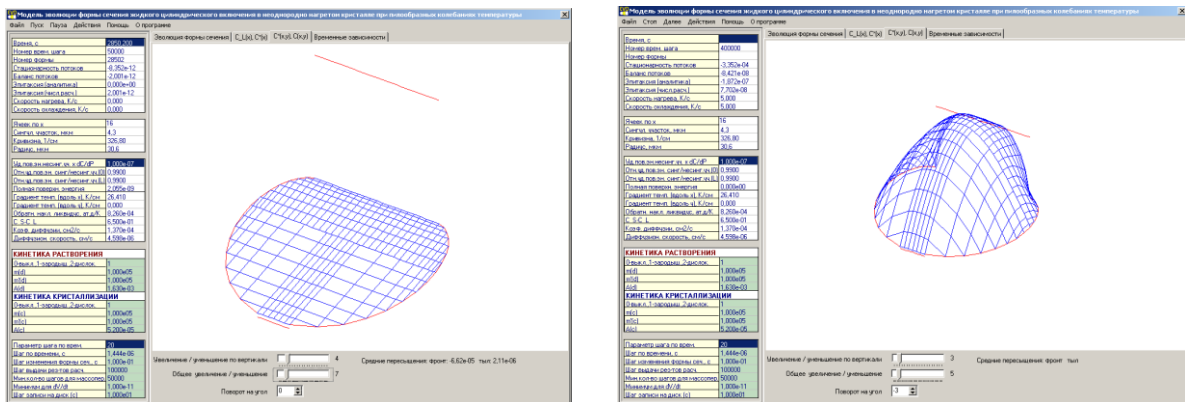


Рисунок 4. Зависимость ликвидусных (зеленый цвет) и равновесных (красный цвет) концентраций вдоль межфазной границы от координаты  $x$  (закладка « $C_L(x), C^*(x)$ »)



а

б

Рисунок 5. Двумерное распределение равновесных концентраций вдоль межфазной границы (красные линии) и фактических концентраций в жидкой фазе (синие линии) (закладка « $C^*(x,y), C(x,y)$ ») в установившемся режиме термомиграции в стационарных тепловых условиях (а) и на стадии охлаждения при пилообразных колебаниях температуры (б)



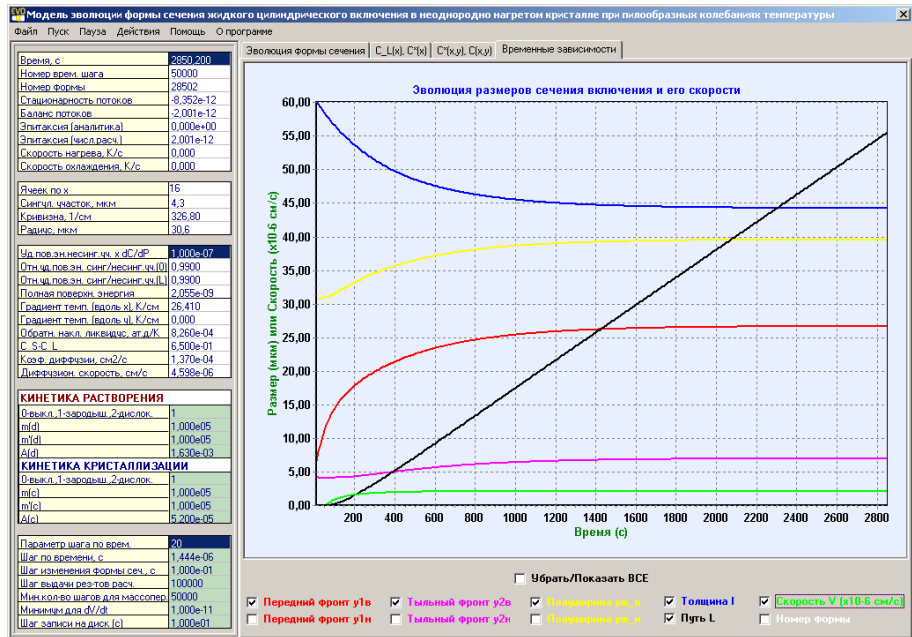


Рисунок 6. Временные зависимости скорости включения, размеров его сечения и пройденного пути (закладка «Временные зависимости»)

В программе предусмотрена возможность вызова модуля справки (пункт меню **Помощь**, рис. 3, а), в которой представлена краткая инструкция по работе с Программой.

## 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 **NEvo2D-K.exe** и файл справки с именем **NEvo2D-K -help.pdf**. Для своей работы программа не требует инсталляции: ее работа начинается сразу же после запуска на исполнение файла **NEvo2D-K.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 справочной информацией к ней (файл **NEvo2D-K-help.pdf**) и следующими статьями авторов Программы:

- Gershanov, V.Yu. Computer Simulation of Thermomigration Process/ V.Yu. Gershanov, S.I. Garmashov, A.R. Minyaev, and A.V. Beletskaya // Semiconductor Process and Device Performance Modeling: Mater. Res. Soc. Proc. -Warrendale, PA, USA, 1998. – V.490. –P.135–140.
- Гершанов, В.Ю. Эффект переключения потоков компонентов жидкой фазы асимметричными колебаниями температуры/ В.Ю. Гершанов, С.И. Гармашов, А.В. Белецкая, А.Р. Миняев// Кристаллография.-2000.-Т.45, N 3.-С.568-572.
- Gershanov, V.Yu. The capillarity influence on shape of small liquid inclusions enclosed in a solid under non-stationary thermal conditions/ V.Yu. Gershanov, S.I. Garmashov, A.R. Minyaev, N.E. Ivanov, I.Yu. Nosuleva // Growth, Evolution and Properties of Surfaces, Thin Films and Self-Organized Structures: Mater. Res. Soc. Proc.-USA, 2000.-Vol.648.
- 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.
- Gershanov, V.Yu. Non-Stationary Nonlinear Effects at Mass Transfer in Small Volumes of Solution in Melt Enclosed in Anisotropic Crystal/ V.Yu. Gershanov, S.I. Garmashov // J. Cryst. Growth. - 2009.- V. 311, N. 9. - P. 2722-2730.
- Гармашов, С.И. Моделирование эволюции формы сечения

жидких цилиндрических включений в кристалле при нарушении равновесия / С.И. Гармашов, В.Ю. Гершанов // Сборник трудов XIII Всероссийской конференции-школы "Современные проблемы математического моделирования", 14–19 сентября 2009 г., пос. Дюрсо.–Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2009. –С.168–175.

Для возможности открытия файла **NEvo2D-K-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](mailto:garmashov@sfedu.ru)

Гершанов Владимир Юрьевич [yugershanov@sfedu.ru](mailto:yugershanov@sfedu.ru)