

19-24 августа 2019 г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия

СБОРНИК ТРУДОВ в 4 томах

TOM 2

Механика жидкости и газа

Уфа РИЦ БашГУ 2019 УДК 531/534 ББК 22.2 Д23

XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики: сборник трудов в 4 томах.

Д23 Т. 2: Механика жидкости и газа. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2019.—1328 с.

ISBN 978-5-7477-4952-8

DOI: 10.22226/2410-3535-2019-congress-v2

Том 2 содержит расширенные тезисы секционных, устных и стендовых докладов секции II.

УДК 531/534 ББК 22.2

ISBN 978-5-7477-4952-8

© БашГУ, 2019 © ИПСМ РАН, 2019

СОПРЯЖЕННЫЕ ЗАДАЧИ ГИДРОМЕХАНИКИ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ИЗ СОЛЕВЫХ РАСТВОРОВ

Н.А. Верезуб, А.И. Простомолотов

Институт проблем проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва verezub@ipmnet.ru

Аннотация. Исследованы процессы гидродинамики и массообмена в оригинальной конструкции проточного кристаллизатора для выращивания смешанных кристаллов KCNSH из смеси двух водно-солевых растворов (кобальтовой KCSH и никелевой KNSH солей). Дано объяснение причин возникновения дефектов перемежаемости темных и светлых участков на поверхности растущего кристалла, выявляемых с помощью рентгеновской топографии. Предложена закрутка раствора, вытекающего из трубки с большой скоростью, для устранения радиальной неоднородности состава растущего смешанного кристалла.

Работа выполнена на вычислительной базе ИПМех РАН (тема № АААА-А17-117021310373-3) при поддержке грантов РФФИ: 18-02-00036, 17-08-00078 и гранта РНФ: 18-12-16007.

Введение

Оригинальная конструкция проточного кристаллизатора применяется для выращивания смешанных кристаллов KCNSH из смеси двух водно-солевых растворов (кобальтовой KCSH и никелевой KNSH солей) с их разным молярным соотношением [1,2].

Математическая модель кристаллизатора и результаты расчетов

Суть этого процесса выращивания состоит в следующем (см. Рис. 1а). Раствор втекает вертикально вверх из трубки на дне цилиндрического сосуда с заданной скоростью и обтекает поверхность растущего кристалла. Осаждение солей на поверхность кристалла обеспечивает его наращивание сверху вниз по всему диаметру сосуда. Затем «отработавший» раствор вытекает через открытую часть дна сосуда.



Рис. 1. Проточный кристаллизатор: а – расчетная модель (трубка - 1 для втекания раствора - 3 с заданной скоростью V_{jet} в цилиндрический сосуд - 2, растущий кристалл - 4, вытекание раствора через поверхность – 5), б – линии тока раствора при V_{iet} = 0.9 м/с. Размеры кристаллизатора: D×H = 0.03×0.04 м², диаметр трубки: d = 0.003 м.

Картина циркуляции раствора в сосуде показана на Рис. 16 для достаточно большой скорости втекания $V_{jet} = 0.9$ м/с без закрутки струи ($\Omega_{jet} = 0$). Втекающая струя сталкивается с твердой преградой в виде поверхности кристалла, в результате чего меняет осевое направление течения на радиальное. Ввиду большой скорости центробежной струи вблизи поверхности кристалла возникает интенсивная вихревая циркуляция при её столкновении с боковой стенкой сосуда, из которой раствор интенсивно стекает вниз в узкой центральной части сосуда (вне области втекания), причем в остальной радиально-периферийной области возникает слабая замкнутая циркуляция, запирающая опускное течение.

Параметры осаждения (кристаллизации) разных солей отличаются коэффициентами диффузии и скоростями роста граней. Для оценочных расчетов по модели [3] коэффициенты диффузии задавались следующими: $D_1 = 1.217 \times 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ и $D_2 = 1.075 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$. Скорость кристаллизации бралась для грани (110): V = 0.58 мм/сут.

Пространственные распределения концентрации солей примерно одинаковые: в соответствии с картиной течения на Рис. 16 в растворе возникает распределение концентрации солей, изолинии которого показано на Рис. 2а. Можно отметить характерный «язык» в распределении изолиний вблизи поверхности кристалла, обусловленный большой радиальной скоростью струи вдоль кристалла и её поворотом вблизи боковой стенки кристаллизатора.



Рис. 2. Распределения концентрации примеси при $V_{jet} = 0.9 \text{ м/c}$: а – изолинии для $D_1 = 1.217 \times 10^{-9} \text{ м}^2/\text{c}$, б – радиальные графики при z = 0.0395 м для двух солей: $I - D_1 = 1.217 \times 10^{-9}$, $2 - D_2 = 1.075 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{c}$ в случае не вращающейся струи, 3 – при её вращении со скоростью 30 об/мин, C_o – концентрация солей во втекающей струе.

Однако радиальные профили концентрации солей различаются в сечении, близком к поверхности кристалла (z = 0.0395 м). Это можно видеть на Рис. 26, где соответствующие линии несколько раз пересекаются, что свидетельствует о радиальной неоднородности концентрационного состава вблизи поверхности кристаллизации, т.е. перемежаемости областей кобальтового и никелевого концентрационного преобладания. На выращенном образце смешанного кристалла это проявляется в виде чередования темных и светлых пятен на рентгеновском снимке поперечного сечения кристалла (Рис. 3а).

Средствами математического моделирования такое визуальное проявление чередования пятен проявляется при учете микро-шероховатости поверхности кристаллизации. В математической модели микрошероховатость задавалась в виде регулярно расположенных на поверхности кристалла ступеней высотой 0.13 и длиной 3 мм, между которыми располагались микрокюветы (Рис. 3б). Поэтому при обтекании раствором поверхности растущего кристалла наряду с основным потоком в кюветах возникали дополнительные микровихри, которые локально изменяли скоростное поле и процесс массообмена на участках этих кювет.

Эти изменения были визуализированы с помощью трехмерной картины течения вблизи поверхности кристалла, показанной на Рис. Зв, где чередования радиально расположенных локальных областей светлого и более темного цвета соответствует наличию микровихрей в микрокюветах. Их расположение соответствует экспериментальному снимку на Рис. За и объясняет этот эффект.



Рис. 3. Сравнение с экспериментом: а – чередование темных и светлых полос на рентгеновском снимке поперечного сечения смешанного кристалла [2], б – картина обтекания кристалла, в – картина течения раствора во всем объеме (1) и вблизи кристалла (2) при учете его шероховатости.

Для устранения этого негативного эффекта были проведены расчеты для закрученного струйного втекания в кристаллизатор, которые показали, что при вращении струи с угловой скоростью $\Omega_{jet} = 30$ об/мин радиальные распределения концентраций обеих солей становятся однородными (см. пунктир 3 на Рис. 2б).

Заключение

Выполнено математическое моделирование гидродинамических и массообменных процессов при выращивании смешанных кристаллов из смеси двух водно-солевых растворов (кобальтовой и никелевой солей). Эти соли растворяются в воде до уровня насыщения при высокой температуре и затем такой пересыщенный раствор прокачивается через кристаллизатор специальной конструкции при более низкой температуре. Рассмотрены и объяснены причины возникновения дефектов перемежаемости граней на поверхности растущего кристалла, выявляемые с помощью рентгеновской топографии. Предложена закрутка раствора, втекающего в кристаллизатор, для устранения радиальной неоднородности состава растущего кристалла.

Литература

- 1. В.В. Гребнев, С.И. Ковалев, А.Э. Волошин и др. // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 6. С. 994-1003.
- 2. A.E. Voloshin, V.L. Manomenova, E.B. Rudneva et al. // Journal of crystal growth. 2018. V. 500. P. 98–103.
- A.I. Prostomolotov, N.A. Verezub, A.E. Voloshin // IUTAM Symposium on Mechanical Design and Analysis for AM technologies. 20–25 August 2018, Moscow: IPMech RAS. P. 69–72.