



**Восьмая Международная конференция
«Кристаллофизика и деформационное
поведение перспективных материалов»**

5–8 ноября 2019

МОСКВА



Министерство науки и высшего образования РФ
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред
Межгосударственный Координационный Совет
по физике прочности и пластичности материалов
Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»
Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики твердого тела РАН

**Восьмая Международная конференция
«КРИСТАЛЛОФИЗИКА И ДЕФОРМАЦИОННОЕ
ПОВЕДЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ»**

**посвященная 150-летию открытия Д.И. Менделеевым
Периодического закона химических элементов**

**Третья Международная Школа Молодых Ученых
«АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ»**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

*Конференция проводится
при финансовой поддержке
Российского Фонда Фундаментальных Исследований
(грант № 19-02-20013)*

ISBN 978-5-907226-33-3

**МОСКВА
5-8 ноября 2019 г.**

ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ КАССЕТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ХАЛЬКОГЕНИДОВ

Простомолотов А.И. , Вerezуб Н.А.

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, РФ

prosto@ipmnet.ru

Рассмотрены результаты математического моделирования тепловых процессов для новой модификации метода Бриджмена в виде процесса «кассетной» кристаллизации термоэлектрических материалов на основе халькогенидов [1]. Выполнено моделирование процесса кристаллизации как для отдельной кассеты, так и для всей геометрии ростового узла. Они опираются на методические разработки авторов по сопряжению конечно-элементных и конечно-разностных моделей и их программные реализации [2].

При определенных технологических условиях в кассете может возникать тепловая неустойчивость, вызванная действием тепловой гравитационной конвекции. Для отдельной кассеты процессы гидродинамики и теплопереноса с учетом кристаллизации расплава моделировались численно на основе решения уравнений Навье-Стокса и теплопереноса в приближении Буссинеска. Процесс кристаллизации описывался введением в уравнение теплопереноса источника выделения скрытой теплоты кристаллизации в некотором переходном слое – между изотермой ликвидуса $T_L = 859$ К и солидуса $T_S = 857$ К. В ростовом процессе при медленном охлаждении реально реализуется слабый конвективный режим, при котором возникают симметричные вихревые структуры в расплаве, обеспечивающие слегка выпуклый в расплав фронт кристаллизации. Однако при быстром снижении нагревательной мощности происходит смена устойчивого вертикального градиента температуры в кассете на неустойчивый профиль, что вызывает конвективное движение, существенно искривляющее форму фронта кристаллизации, а последнее способствует возникновению дендритного роста.

В трехмерной модели теплового узла учитывается радиационный нагрев блока кассет от резистивного нагревателя играет значительную роль. Уравнения радиационно-кондуктивного теплопереноса и кристаллизации решаются для сложной геометрии теплового узла, состоящего из элементов с разными теплофизическими свойствами [2]. Устойчивый вертикальный температурный градиент сохранялся на всех стадиях процесса кристаллизации. Уменьшение этого градиента во время ростового процесса происходило путем снижения тепловой мощности нагревателя. Проведена оптимизация тепловой системы для снижения нагревательной мощности во время ростового процесса, а также предложены способы улучшения конструкции и теплоизоляционных материалов ростового узла.

Работа выполнена на вычислительной базе ИПМех РАН (тема № АААА-А17-117021310373-3) при поддержке гранта РФФИ: 18-02-00036.

1. Белов Ю.М. и др. // Патент РФ, № 2402111. 20.10.2010. 15 с.
2. Простомолотов А.И., Вerezуб Н.А., Ильясов Х.Х. Дистанционное и сопряженное моделирование тепломассопереноса и дефектообразования в технологических процессах // Изв. ВУЗов. МЭТ. 2015. Т. 18, № 1. С. 31–36.

DOI: 10.26201/ISSP.2019.45.557/Def.Mater.165