



XXXII научная конференция «Современные информационные технологии: тенденции и перспективы развития (СИТО 2025)»

Доклад на тему:

Разработка и тестирование компьютерной программы, моделирующей миграцию трехмерного включения в кристалле

Выполнил студент 4 курса 5 группы Тонконогов Н. И.,

tonkonogov@sfedu.ru

Научный руководитель к.ф.-м.н. Гармашов С. И.

Ростов-на-Дону,
2025 г.

Цель и задачи

Цель — построение компьютерной модели формы трехмерного включения в кристалле и массопереноса в нем.

Задачи:

1. Проанализировать формы реальных включений и определиться с их модельным представлением;
2. Разработать алгоритм моделирования собственными силами методом конечных разностей;
3. Протестировать его на задачах с известными решениями и с простой, но трехмерной геометрией в виде прямоугольного параллелепипеда;
4. Расширить этот алгоритм на случай массопереноса во включении выбранной (более сложной) геометрии;
5. Протестировать построенную модель и сравнить с результатами натурных экспериментов;
6. Сравнить с результатом построения собственной модели с двумерной моделью, полученной в аналогичной программе.

Метод граней

Форма реального включения [1]

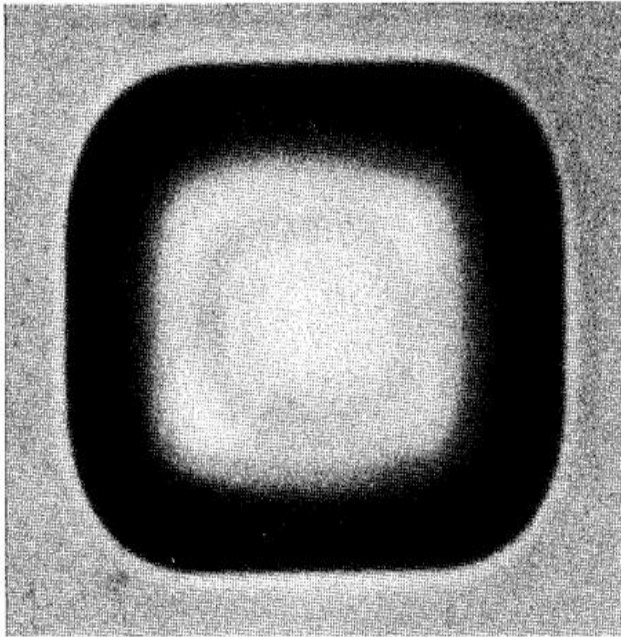
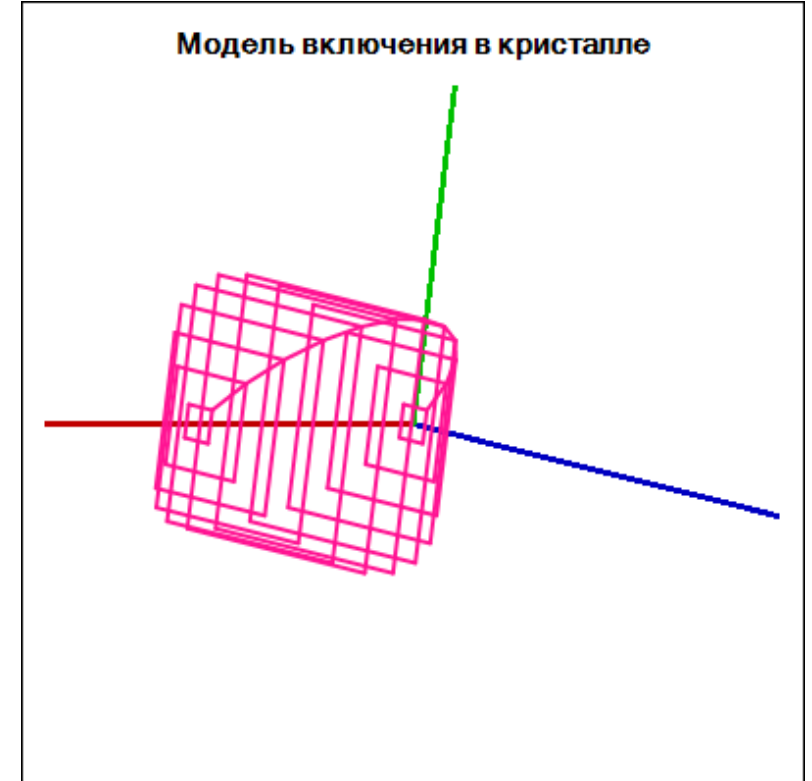


FIG. 1. The rounded cubic shape of a brine inclusion in KCl equilibrated for seven years is viewed parallel to the (100) plane. 1600 $\times$.

Модельная форма включения
(аппроксимирована гранями с разным
наклоном и размером)



Уравнение диффузии

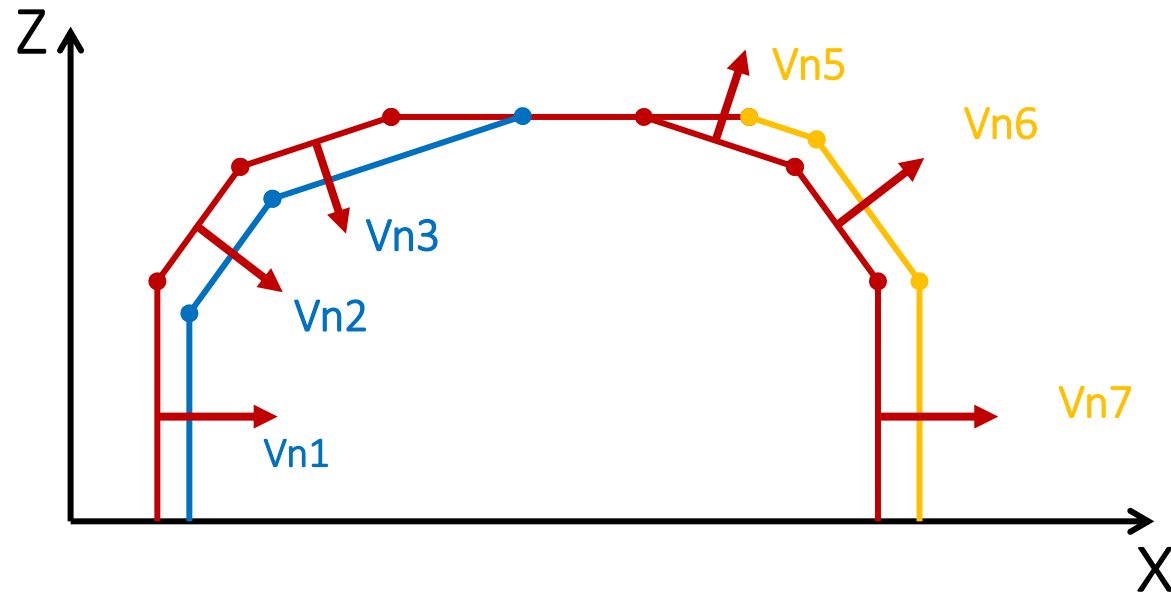
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

Конечно-разностный вид:

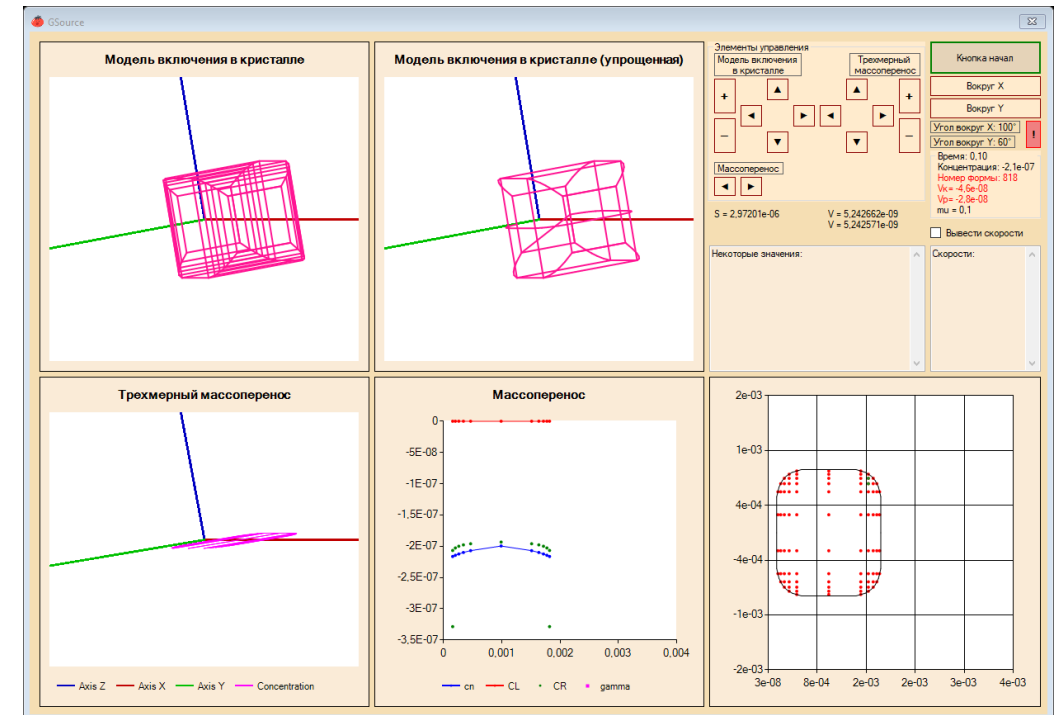
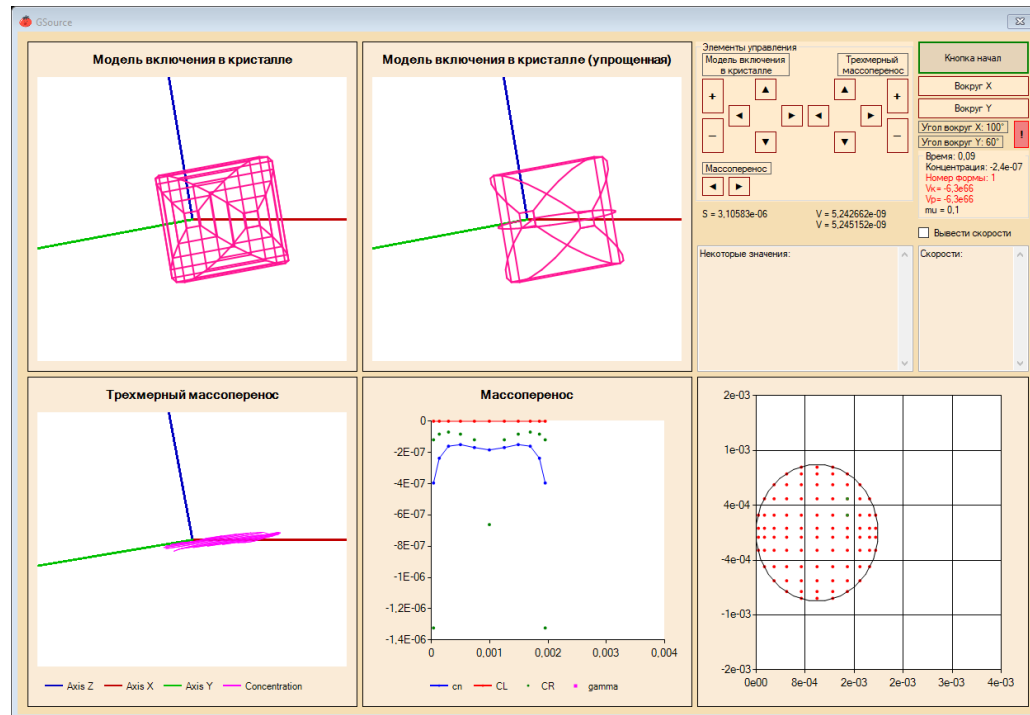
$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &\approx \frac{(C_{\text{нов}}[i,j,k] - C_{\text{стар}}[i,j,k])}{\Delta t}, \\ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} &\approx \frac{(C_{\text{стар}}[i+1,j,k] - 2C_{\text{стар}}[i,j,k] + C_{\text{стар}}[i-1,j,k])}{\Delta x^2}, \\ \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} &\approx \frac{(C_{\text{стар}}[i,j+1,k] - 2C_{\text{стар}}[i,j,k] + C_{\text{стар}}[i,j-1,k])}{\Delta y^2}, \\ \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} &\approx \frac{(C_{\text{стар}}[i,j,k+1] - 2C_{\text{стар}}[i,j,k] + C_{\text{стар}}[i,j,k-1])}{\Delta z^2}, \end{aligned}$$

где $C_{\text{нов}}[i,j,k]$ и $C_{\text{стар}}[i,j,k]$ обозначают значения концентрации в узле $[i,j,k]$ пространственной сетки на новом и предыдущем временном шагах соответственно.

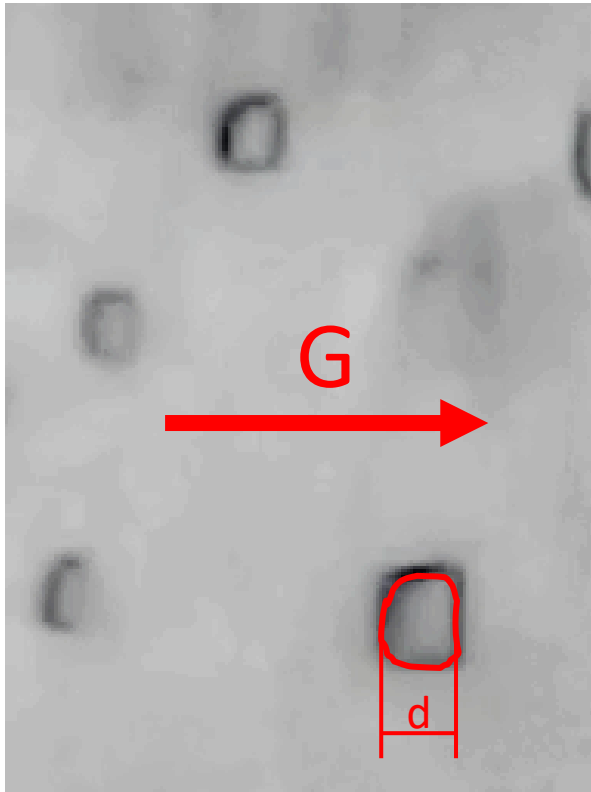
Алгоритм изменения формы включения по скоростям граней, рассчитанным из решения уравнения диффузии



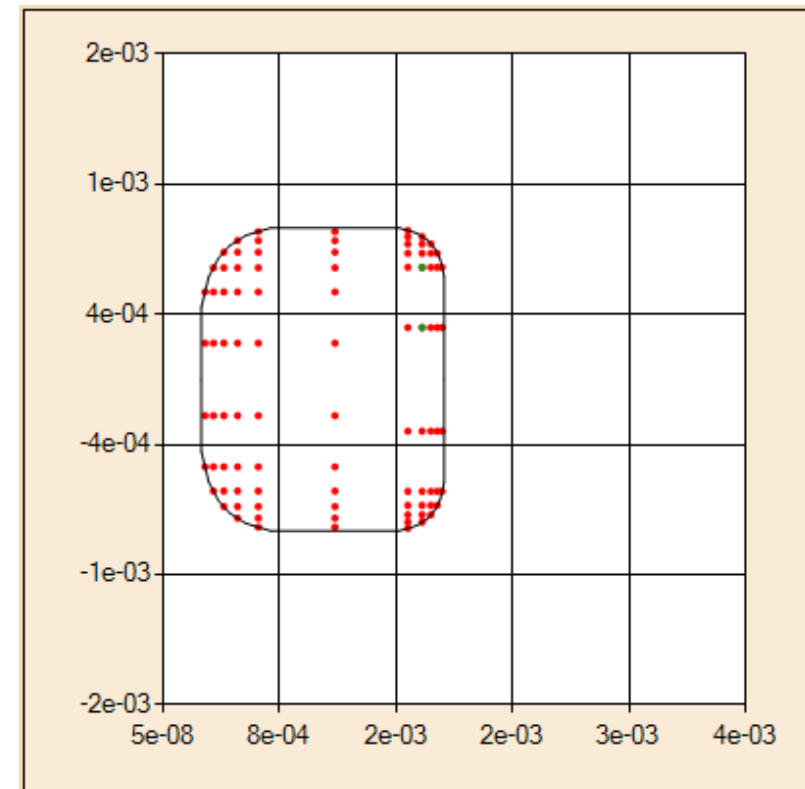
Эволюция формы включения от неравновесной к равновесной



Сравнение трёхмерной модели эволюции формы мигрирующего включения с натурным экспериментом

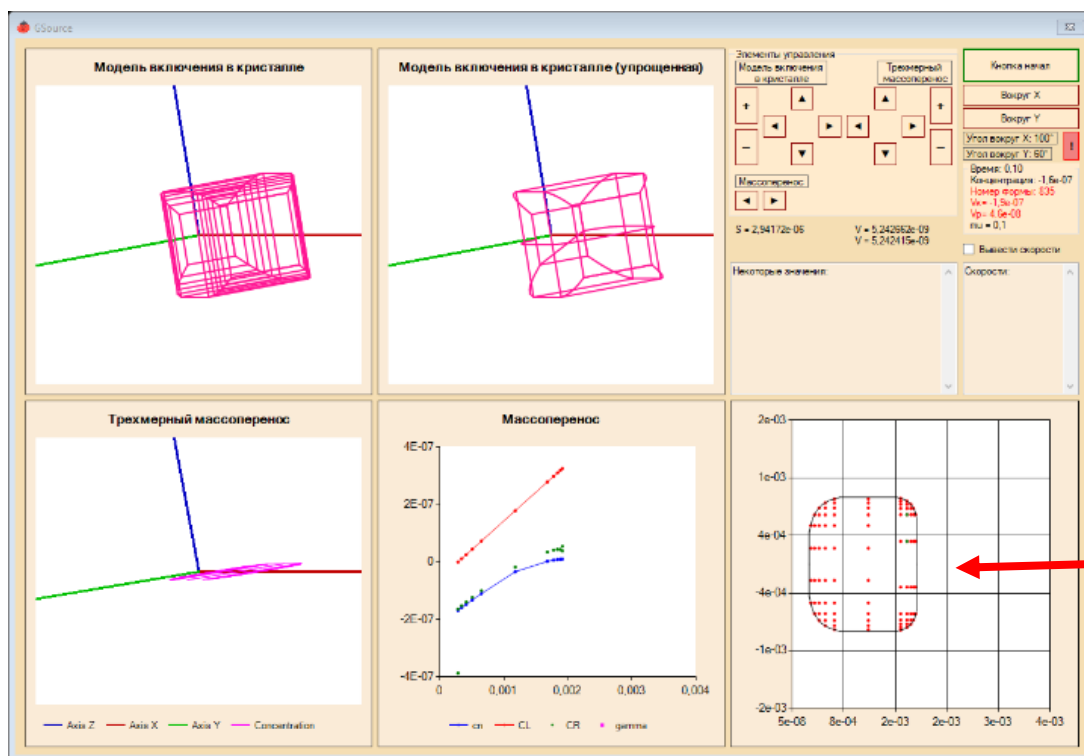


Результат эксперимента по термомиграции включений в кристалле KBr[2].
 $d = 30$ мкм – исходная ширина нижнего включения, G – градиент температур

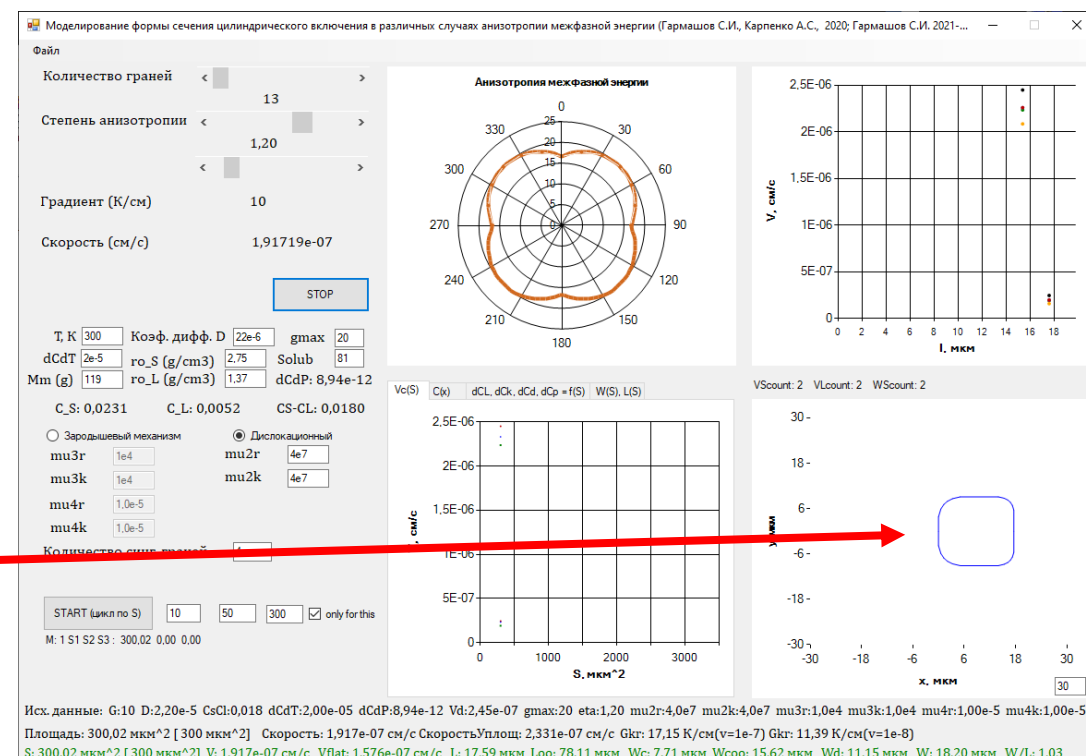


Сечение моделируемой трехмерной формы включения

Сравнение трехмерной и двумерной моделей



Трехмерная модель



Двумерная модель

Выводы

1. Разработанный алгоритм и соответствующая компьютерная программа позволяют моделировать трехмерный массоперенос во включении, заключенном внутри кристалла, и эволюцию его формы.
2. Проведенное тестирование программы показало, что программа пригодна для использования и дальнейшего учета в ней особенностей межфазной кинетики, при которых форма включения изменяется при его движении.
3. Разработанная программа трёхмерного моделирования пригодна для оценки пределов применимости двумерной модели формы включения.

Как известно [1, 2], двумерные модели проще использовать для интерпретации экспериментальных данных по термомиграции [1-5], но они могут недостаточно корректно описывать реальную форму трёхмерных включений в кристаллах и массоперенос в них. Трёхмерное представление позволяет учитывать сложные геометрические особенности включений, такие как криволинейность некоторых участков границы и анизотропию свойств материала, что делает модели более реалистичными и пригодными для практического применения. В то же время разработка трехмерной модели включения в кристалле заметно сложнее, чем двумерной. В настоящем докладе сообщается об одном из подходов для трехмерного моделирования включения и о полученных результатах.

Реальное включение в кристалле, как правило, ограничено плоскими (сингулярными) участками межфазной границы, которые соединяются несингулярными (криволинейными, атомно-шероховатыми) участками. В предлагаемой модели предполагалось, что включение имеет форму прямоугольного параллелепипеда, но с округлыми ребрами, то есть ограничено шестью сингулярными гранями, которые соединены криволинейными участками. Для аппроксимации криволинейных границ использовался метод граней [1].

Граничные условия в рассматриваемой задаче определяются не только температурой, но и межфазным давлением, которое зависит от размеров аппроксимирующих граней. Кроме этого, надо учесть, что потоки на шести сингулярных гранях определяются

механизмом межфазных процессов, то есть зависимостью (как правило, нелинейной) скорости кристаллизации (растворения) на этих гранях от пересыщения (недосыщения). На несингулярных гранях (в нашем случае – наклонных гранях, аппроксимирующих реальные криволинейные участки границы включения) можно считать пересыщения крайне малыми, так что фактическая концентрация раствора на них равна равновесной.

Для описания массопереноса в модельном включении требовалось решение трехмерного нестационарного уравнения диффузии. Для данной задачи решить уравнение диффузии аналитически не представляется возможным, поскольку граничные условия, в общем случае, нелинейны. Поэтому возникала необходимость в использовании численного метода – метода сеток [6]. С этой целью уравнение диффузии переписывалось в конечно-разностном виде для последующей алгоритмизации и компьютерного моделирования.

Построенная трехмерная сетка имела переменный шаг и, вообще говоря, разное количество узлов в разных плоскостях. Кроме того, из-за деформации включения при миграции под действием градиента температуры приходилось использовать две трехмерных сетки в разных частях включения. Несоответствие положений узлов в этих сетках потребовало применения билинейной интерполяции для расчетов диффузионных потоков на стыке сеток.

Многократное решение уравнения диффузии для каждой новой формы включения позволяло моделировать

её эволюцию в разных условиях. Визуализация формы трехмерного включения осуществлялась с помощью отдельного программного кода через проекцию на плоскость под разными задаваемыми углами, что упрощает анализ результатов.

Компьютерная моделирующая программа была написана на языке программирования C++ CLI/Forms.

При изучении термомиграции включений в кристалле одним из важных вопросов является выяснение степени влияния кинетики межфазных процессов на скорость и форму мигрирующего включения. Поэтому в настоящем докладе в качестве демонстрации корректного функционирования разработанной программы мы приводим некоторые результаты моделирования, полученные при разной степени затрудненности межфазных процессов на сингулярных гранях.

Следует отметить, что продолжительность моделирования эволюции формы включения от равновесной до установившейся неравновесной составляет около 5 минут при количестве узлов 1000.

Таким образом, созданная модель позволяет визуализировать эволюцию формы трёхмерного включения в кристалле и представляет интерес для анализа влияния различных параметров на форму включения, проверки теоретических моделей и прогнозирования поведения включений в кристаллах при различных условиях.

Список используемых источников

1. Cline, H. E. Nonequilibrium morphology of liquid inclusions migrating in solids / H. E. Cline, T. R. Anthony // J. Appl. Phys. – 1977. – Vol. 48. – P. 5096–5104.
2. Гармашов, С. И. Модель термомиграции жидких цилиндрических включений в кристалле и ее применение : монография / С. И. Гармашов ; Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2022. – 99 с.
3. Леммлейн, Г. Г. Перемещение жидкого включения в кристалле по направлению к источнику тепла / Г. Г. Леммлейн // Докл. АН СССР. – 1952. – Т. 85, № 2. – С. 325–328.
4. Tiller, W. A. Migration of a liquid zone through a solid: Part I / W. A. Tiller // J. Appl. Phys. – 1963. – Vol. 34, N. 9. – P. 2757–2762.
5. Лозовский, В. Н. Зонная перекристаллизация градиентом температуры полупроводниковых материалов / В. Н. Лозовский, Л. С. Лунин, В. П. Попов. – М.: Металлургия, 1987. – 232 с.
6. Калиткин, Н. Н. Численные методы: учеб. пособие. — 2-е изд., исправленное. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011. — 592 с.: ил. — (Учебная литература для вузов)