УДК 536.421.4

НАПРАВЛЕННОЕ ЗАТВЕРДЕВАНИЕ С ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ ЖИДКОЙ ФАЗЫ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСИ

© 2020 г. Д. В. Александров[a, *], И. В. Александрова[a], А. А. Иванов[a], И. О. Стародумов[a], Л. В. Торопова[a]

[a]*Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, кафедра теоретической и математической физики, Лаборатория многомасштабного математического моделирования, Екатеринбург, Россия*

**e-mail: dmitri.alexandrov@urfu.ru*

Поступила в редакцию 17.05.2019 г.
После доработки 28.05.2019 г.
Принята к публикации 16.06.2019 г.

Исследован процесс квазистационарной кристаллизации бинарной системы с двухфазной областью при учете зависимости плотности жидкой фазы от температуры и концентрации примеси. Определены аналитические решения нелинейной системы уравнений тепло- и массопереноса. Найдены распределения концентрации примеси, температуры и доли твердой фазы, скорость процесса затвердевания и положения межфазных границ твердая фаза–двухфазная область и двухфазная область–жидкая фаза.

Ключевые слова: фазовые переходы, направленная кристаллизация, двухфазная область

DOI: 10.31857/S0235010620010028

ВВЕДЕНИЕ

Процессы структурно-фазового превращения из жидкого состояния в твердое лежат в основе многих технологических процессов получения материалов с необходимыми свойствами [1–6]. Часто такие процессы протекают при наличии области (двухфазной зоны), заполненной растущими элементами твердого материала и жидкостью. Особенности процесса кристаллизации в двухфазной зоне определяют формирующиеся свойства твердого материала, получаемого путем затвердевания из жидкого состояния.

Первые математические модели затвердевания с двухфазной зоной были предложены в работах [6–8]. Эти модели описываются нелинейными интегро-дифференциальными уравнениями переноса тепла и примеси при наличии движущихся границ структурно-фазовых превращений, законы движения которых неизвестны и должны быть определены из решения задачи. Отметим, что общих методов решения таких задач не существует и каждый отдельный процесс требует разработки особенных (зачастую уникальных) подходов к решению модели.

Следует специально подчеркнуть разработанный ранее метод перехода к новой независимой переменной (доле твердой фазы в двухфазной зоне) для интегрирования нелинейных уравнений квазиравновесной двухфазной области (когда переохлаждение компенсируется выделяемой теплотой фазового превращения при росте твердой фазы), кристаллизующейся с постоянной скоростью [9–12]. Аналитический метод, основанный на разложении искомых функций в степенные ряды по автомодельной

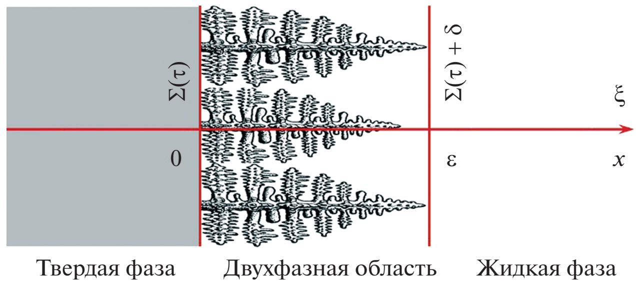

Рис. 1. Схематическая иллюстрация процесса направленной кристаллизации с двухфазной областью.

переменной, был разработан в статьях [13, 14] для описания процесса кристаллизации бинарного расплава, когда скорость движения границ двухфазной зоны обратно пропорциональна квадратному корню из времени. Затем этот метод был применен в работах [15, 16] для описания автомодельной кристаллизации трехкомпонентных систем с двумя областями фазового превращения – основной и котектической двухфазными зонами. Аналитические методы описания нестационарной кристаллизации, когда динамика движения межфазных границ квазиравновесной двухфазной области зависит от временных изменений температуры на охлаждаемой поверхности, были предложены в серии работ [17–23]. Отметим также еще методы аналитического решения уравнений неравновесной двухфазной зоны (когда в модели учитывается нуклеация и рост кристаллов), развитые в работах [23–26].

В настоящей работе предложен метод решения нелинейных уравнений квазиравновесной двухфазной области, затвердевающей с постоянной скоростью, когда плотность жидкой фазы определяется линеаризованным уравнением состояния (зависит от температуры и концентрации примеси в области фазового превращения).

МОДЕЛЬ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА

Рассмотрим процесс направленной кристаллизации бинарной системы вдоль пространственной оси ξ (рис. 1). Двухфазная область располагается между чисто твердым материалом $(\xi < \Sigma(\tau))$ и чисто жидкой фазой $(\xi > \Sigma(\tau) + \delta)$ и имеет протяженность δ. Здесь τ и $\Sigma(\tau)$ обозначают время и координату межфазной границы твердый материал – двухфазная область. Уравнения теплопроводности и диффузии примеси в области фазового превращения $(\Sigma(\tau) < \xi < \Sigma(\tau) + \delta)$ имеют вид:

$$\rho_m C_m \frac{\partial \theta_m}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi}\left(\lambda_m \frac{\partial \theta_m}{\partial \xi}\right) + L_V \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left[(1-\varphi)\sigma_m\right] = \frac{\partial}{\partial \xi}\left(D_m \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi}\right) - k\sigma_m \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \tag{2}$$

где температура θ_m и концентрация примеси σ_m связаны уравнением линии ликвидус

$$\theta_m = \theta_L(\sigma_0) + \Gamma(\sigma_m - \sigma_0). \tag{3}$$

Здесь введены следующие обозначения: ρ_m и C_m – плотность и теплоемкость двухфазной системы, λ_m и D_m – коэффициенты теплопроводности и диффузии примеси в двухфазной области, L_V и k – скрытая теплота кристаллизации и коэффициент распределения примеси, φ и Γ – доля твердой фазы в двухфазном регионе и коэффициент наклона линии ликвидус, σ_0 и θ_L – характерная концентрация примеси и температура ликвидуса. Коэффициенты переноса в двухфазном слое запишем в соответствии с правилом смесей [27]

$$\rho_m C_m(\varphi) = \rho_l C_l (1-\varphi) + \rho_s C_s \varphi, \quad \lambda_m(\varphi) = \lambda_l (1-\varphi) + \lambda_s \varphi, \quad D_m(\varphi) = D_l(1-\varphi), \tag{4}$$

где ρ_l и ρ_s — плотности жидкой и твердой фаз, C_l и C_s — их теплоемкости, а D_l — коэффициент диффузии примеси в расплаве (диффузией примеси в твердой фазе пренебрегаем).

Плотность жидкой фазы будем описывать линеаризованным уравнением состояния

$$\rho_l = \rho_0 \left[1 - \alpha^*(\theta_m - \theta_L(\sigma_0)) + \beta^*(\sigma_m - \sigma_0)\right], \tag{5}$$

где ρ_0 — характерная плотность, а α^* и β^* — коэффициенты расширения, соответствующие температуре и концентрации примеси.

Граничные условия на межфазных поверхностях твердая фаза–двухфазная область $(\xi = \Sigma(\tau))$ и двухфазная область–жидкость $(\xi = \Sigma(\tau) + \delta)$, имеют вид [6–10]

$$\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial \xi} - \lambda_m \frac{\partial \theta_m}{\partial \xi} = L_V(1-\varphi_*)\frac{d\Sigma}{d\tau}, \quad (1-k)(1-\varphi_*)\sigma_m \frac{d\Sigma}{d\tau} + D_m \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi} = 0, \quad \xi = \Sigma(\tau), \tag{6}$$

$$\sigma_m = \sigma_l, \quad \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi} = \frac{\partial \sigma_l}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial \theta_m}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta_l}{\partial \xi}, \quad \varphi = 0, \quad \xi = \Sigma(\tau) + \delta. \tag{7}$$

Здесь θ_s и θ_l — температуры в твердой и жидкой фазах, а σ_l и φ_* — концентрация примеси в расплаве и доля твердой фазы на границе $\xi = \Sigma(\tau)$.

Будем рассматривать процесс направленной кристаллизации при фиксированных градиентах температуры в твердой (g_s) и жидкой (g_l) фазах, а распределение концентрации примеси в расплаве — моделировать стандартным уравнением диффузии примеси, т.е.

$$\begin{gathered} \frac{\partial \theta_s}{\partial \xi} = g_s, \quad \xi < \Sigma(\tau), \quad \frac{\partial \theta_l}{\partial \xi} = g_l, \quad \xi > \Sigma(\tau), \quad \frac{\partial \sigma_l}{\partial \tau} = D_l \frac{\partial^2 \sigma_l}{\partial \xi^2}, \quad \xi > \Sigma(\tau) + \delta, \\ \sigma_l \to \sigma_0, \quad \xi \to \infty. \end{gathered} \tag{8}$$

Отметим, что δ, g_s и g_l считаются неизменными величинами в установившемся процессе затвердевания с постоянной скоростью $d\Sigma/d\tau = u_s$. Модель этого процесса кристаллизации (1)–(8) является нелинейной дифференциальной моделью в частных производных с двумя движущимися границами фазового превращения. Общих методов решения таких задач не существует, а рассматриваемый ниже метод является оригинальным подходом, позволяющим получить аналитические решения модели (1)–(8).

МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ С ДВУХФАЗНОЙ ОБЛАСТЬЮ

Для удобства дальнейшего решения введем безразмерные переменные и параметры следующим образом:

$$\begin{gathered} x = \frac{u_s}{D_l}(\xi - u_s\tau), \quad c_m = \frac{\sigma_m}{\sigma_0}, \quad c_l = \frac{\sigma_l}{\sigma_0}, \quad T_m = \frac{\theta_m}{m\sigma_0}, \quad \Lambda_0(\varphi) = \frac{\lambda_m(\varphi)}{\lambda_s}, \\ \tilde{\beta} = (\beta^* + m\alpha^*)\sigma_0, \quad R = \frac{\rho_s C_s}{\rho_l C_l}, \quad m = -\Gamma, \quad T_0 = \frac{\theta_0}{m\sigma_0}, \quad \theta_0 = \theta_L(\sigma_0) - \Gamma\sigma_0, \\ a_1 = \frac{\lambda_s}{\rho_0 C_l D_l}, \quad a_2 = \frac{L_V}{\rho_0 C_l m\sigma_0}, \quad \widetilde{L_V} = \frac{L_V D_l}{\lambda_s m\sigma_0}, \quad G_s = \frac{g_s D_l}{u_s m\sigma_0}, \quad G_l = \frac{g_l D_l}{u_s m\sigma_0}, \\ \varepsilon = \frac{u_s\delta}{D_l}, \quad g(c_m, \varphi) = \left[1 + \tilde{\beta}(c_m - 1)\right](1-\varphi) + R\varphi. \end{gathered} \tag{9}$$

Вышеприведенная модель (1)–(8) при подстановке переменных (9) примет вид

$$g(c_m,\varphi)\frac{dc_m}{dx}+a_1\frac{d}{dx}\left[\Lambda_0(\varphi)\frac{dc_m}{dx}\right]+a_2\frac{d\varphi}{dx}=0,\quad 0<x<\varepsilon, \tag{10}$$

$$T_m=T_0-c_m,\quad 0<x<\varepsilon, \tag{11}$$

$$\frac{d}{dx}[(1-\varphi)c_m]+\frac{d}{dx}\left[(1-\varphi)\frac{dc_m}{dx}\right]+kc_m\frac{d\varphi}{dx}=0,\quad 0<x<\varepsilon, \tag{12}$$

$$G_s+\Lambda_0(\varphi_*)\frac{dc_m}{dx}=\widetilde{L_V}(1-\varphi_*),\quad \varphi=\varphi_*,\quad x=0, \tag{13}$$

$$(1-k)c_m+\frac{dc_m}{dx}=0,\quad x=0,\quad \varphi_*\neq 1\quad \text{или}\quad \varphi_*=1,\quad x=0, \tag{14}$$

$$c_m=c_l,\quad \frac{dc_m}{dx}=\frac{dc_l}{dx}=-G_l,\quad \varphi=0,\quad x=\varepsilon, \tag{15}$$

$$\frac{d^2c_l}{dx^2}+\frac{dc_l}{dx}=0,\quad x>\varepsilon,\quad c_l\to 1,\quad x\to\infty. \tag{16}$$

Интегрируя сейчас первое уравнение (16) и учитывая граничные условия (15) и (16) при $x=\varepsilon$ и $x\to\infty$, получим безразмерное распределение концентрации примеси в жидкой фазе

$$c_l(x)=1+G_l\exp(\varepsilon-x),\quad x>\varepsilon. \tag{17}$$

Для отыскания концентрационного профиля в двухфазной зоне (при $0<x<\varepsilon$), найдем производную $dc_m/dx=c_{mx}$ из уравнений (10) и (12) в виде

$$\frac{dc_m}{dx}=\frac{[f_1(\varphi)-f_2(\varphi)c_m]dc_m/d\varphi-f_3(\varphi)-f_4(\varphi)c_m}{f_5(\varphi)}, \tag{18}$$

где

$$f_1(\varphi)=(1-\varphi)\left[a_1\Lambda_0(\varphi)+(\tilde\beta-1)(1-\varphi)-R\varphi\right],\quad f_2(\varphi)=\tilde\beta(1-\varphi)^2,$$
$$f_3(\varphi)=a_2(1-\varphi),\quad f_4(\varphi)=(1-k)a_1\Lambda_0(\varphi),\quad f_5(\varphi)=a_1\left[(1-\varphi)\frac{d\Lambda_0}{d\varphi}+\Lambda_0(\varphi)\right].$$

Подставляя теперь производную dc_m/dx из формулы (18) в уравнение переноса примеси (12), получаем стандартную задачу Коши для определения концентрации примеси $c_m(\varphi)$ в области фазового перехода ($c_m'=dc_m/d\varphi$, $df_5/d\varphi=0$)

$$\frac{d^2c_m}{d\varphi^2}=\frac{F(c_m',c_m,\varphi)f_5(\varphi)-(1-\varphi)h_1(c_m',c_m,\varphi)}{(1-\varphi)h_2(c_m,\varphi)}, \tag{19}$$

$$c_m=1+G_l,\quad \frac{dc_m}{d\varphi}=\frac{f_3(0)+(1+G_l)f_4(0)-G_lf_5(0)}{f_1(0)-(1+G_l)f_2(0)},\quad \varphi=0, \tag{20}$$

где введены обозначения

$$h_1(c_m',c_m,\varphi)=\left[f_1'(\varphi)-f_2'(\varphi)c_m-f_2(\varphi)c_m'\right]c_m'-f_3'(\varphi)-f_4'(\varphi)c_m-f_4(\varphi)c_m',$$

$$h_2(c_m,\varphi)=f_1(\varphi)-f_2(\varphi)c_m,\quad F(c_m',c_m,\varphi)=(1-k)c_m-(1-\varphi)c_m'+c_{mx}(c_m',c_m,\varphi)$$

и использованы выражения (15), (17) и (18).

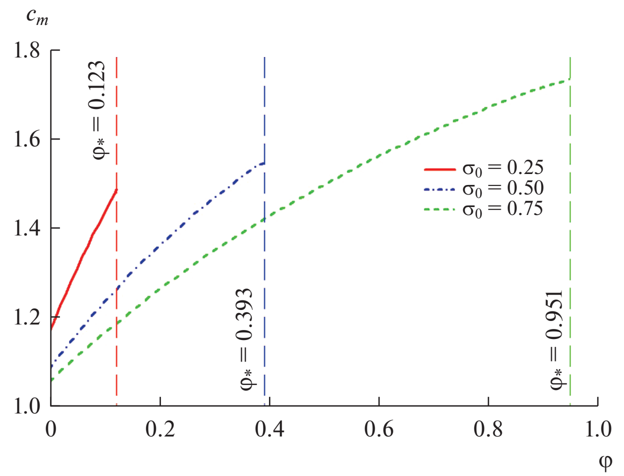

Рис. 2. Концентрация примеси в зависимости от доли твердой фазы в двухфазной области. Вертикальные линии обозначают координату межфазной границы – твердая фаза–двухфазная область, на которой $\varphi = \varphi_*$. Для расчета использовались параметры: $\lambda_l/\lambda_s = 0.565$, $\tilde{\beta} = 0.75$, $\widetilde{L_V} = 0.538$, $R = 0.623$, $k = 0.68$, $a_1 = 4958$, $a_2 = 2.669$, $G_l = 0.057$, $G_s = 0.57$.

Отметим, что при рассмотрении случая $\varphi_* \neq 1$, из граничных условий (13) и (14) можно определить пограничное значение концентрации примеси

$$c_m(\varphi_*) = \frac{G_s - \widetilde{L_V}(1-\varphi_*)}{(1-k)\Lambda_0(\varphi_*)}. \tag{21}$$

Подставляя в левую часть выражения (21) концентрацию примеси из решения задачи Коши (19), (20), определим значение доли твердой фазы φ_* на границе твердый материал–двухфазная область.

Далее, из первого выражения (14) следует уравнение

$$(1-k)c_m(\varphi_*) + c_{mx}(\varphi_*) = 0$$

для отыскания u_s, в котором $c_{mx}(\varphi_*)$ определяется формулой (18). Если теперь $\varphi_* = 1$, то скорость кристаллизации u_s находится из условия (13).

Учитывая теперь, что

$$\frac{dc_m}{dx} = \frac{dc_m}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dx},$$

найдем выражения для безразмерной толщины двухфазной области ε и зависимости $x(\varphi)$, определяющей распределение доли твердой фазы $\varphi(x)$ в двухфазном регионе в виде обратной функции

$$\varepsilon = -\int_0^{\varphi_*} \frac{dc_m/d\varphi_1}{c_{mx}(\varphi_1)} d\varphi_1, \quad x(\varphi) = \varepsilon + \int_0^{\varphi} \frac{dc_m/d\varphi_1}{c_{mx}(\varphi_1)} d\varphi_1, \tag{22}$$

где $c_{mx}(\varphi_1)$ и $dc_m/d\varphi_1$ подставляются из (18)–(20).

Специально отметим, что аналитическое решение (18)–(22) задачи о квазистационарной кристаллизации двухфазной области с учетом непостоянной плотности жидкости, построено в параметрическом виде (параметром является доля твердой фазы в двухфазном регионе).

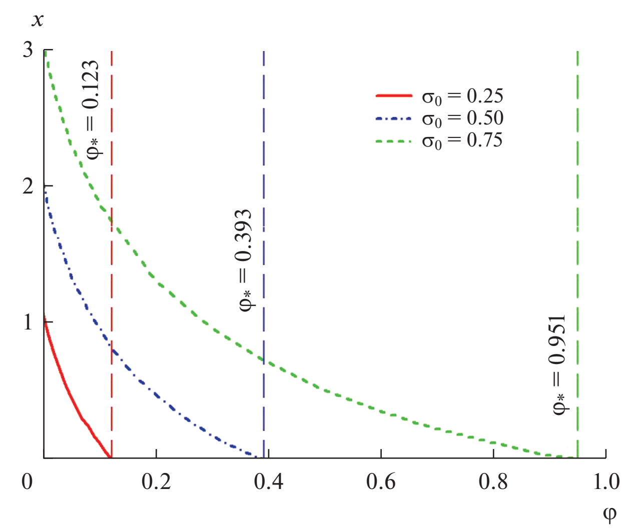

Рис. 3. Зависимость пространственной переменной от доли твердой фазы в двухфазной области. Вертикальные линии обозначают координату межфазной границы – твердая фаза–двухфазная область, на которой $\varphi = \varphi_*$ и $x = 0$.

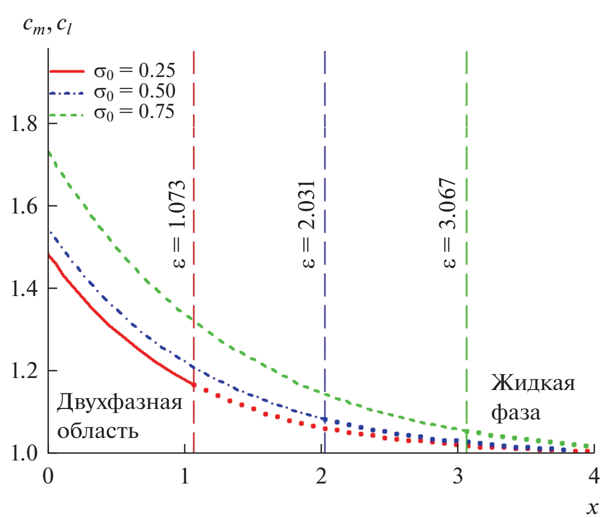

Рис. 4. Концентрация примеси в двухфазной области и жидкой фазе в зависимости от пространственной координаты. Вертикальные линии обозначают координату межфазной границы – двухфазная область–жидкая фаза. Концентрационные профили в жидкой фазе (точечные линии) лежат справа от вертикальных линий при различных концентрациях примеси σ_0.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей статье развито теоретическое описание процесса направленной кристаллизации с областью фазового превращения – двухфазной зоной. На рис. 2–4 показано характерное поведение выведенных в работе аналитических решений (18)–(22).

Поскольку решение построено в параметрическом виде (параметром является φ), на рис. 2 и 3 изображены зависимости концентрации примеси и пространственной координаты от этого параметра: с ростом φ концентрация c_m возрастает, а x — уменьшается. При исключении параметра φ можно построить зависимость концентрации примеси от координаты x, которая показана на рис. 4. Здесь, как и ожидалось, вследствие эффекта вытеснения примеси растущей твердой фазой, c_m с ростом x уменьшается. Распределения концентрации примеси в жидкой фазе, показанные на этом же рисунке точечными линиями, получены с помощью явной зависимости $c_l(x)$ (формула (17)). Отметим, что концентрационные профили в двухфазной зоне $c_m(x)$ и жидкой фазе $c_l(x)$ совпадают на межфазной границе двухфазная область — жидкость ($x = \varepsilon$). Увеличение исходной концентрации σ_0 примеси в расплаве приводит к возрастанию протяженности ε двухфазного региона и доли твердой фазы φ_* на границе $x = 0$ твердый материал — двухфазная область. Концентрационное распределение σ_s в твердой фазе можно получить из выражения $\sigma_s = k\sigma_0 c_m$, вычисленное на границе $x = 0$, которое возникает вследствие эффекта захвата примеси твердым материалом с коэффициентом распределения k. Отметим, что по известному распределению концентрации примеси в двухфазной области можно легко получить распределение температуры с помощью выражения (11). Распределения же температуры в чисто твердой и жидкой фазах задаются известными температурными градиентами G_s и G_l.

Важно отметить, что развитая теория может быть применена к описанию направленной кристаллизации различных веществ, встречающейся в науках о материалах и природных процессах. Предложенный в настоящей работе метод интегрирования нелинейных уравнений тепло- и массопереноса в двухфазной области может быть обобщен на описание более сложных процессов нестационарного затвердевания или кристаллизации с учетом нуклеации зародышей в метастабильной жидкости в духе ранее развитых теорий [17–19, 24, 25].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 18-19-00008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flemings M. Solidification Processing. N.Y.: McGraw Hill. 1974.
2. Chalmers B. Principles of Solidification. N.Y.: Wiley. 1964.
3. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem // Int. J. Heat Mass Trans. 2007. **50**. P. 3616–3623.
4. Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of Solidification // Aedermannsdorf: Trans. Tech. Publ. 1989.
5. Alexandrov D.V., Aseev D.L. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // Comp. Mater. Sci. 2006. **37**. P. 1–6.
6. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. М.: Металлургия. 1987.
7. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // Q. J. Appl. Maths. 1983. **36**. P. 505–539.
8. Fowler A.C. The formation of freckles in binary alloys // IMA J. Appl. Math. 1985. **35**. P. 159–174.
9. Alexandrov D.V., Aseev D.L. One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: Thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // J. Fluid Mech. 2005. **527**. P. 57–66.
10. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection // Acta Mater. 2006. **54**. P. 2401–2406.
11. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth // Phys. Earth Planet. Inter. 2011. **189**. P. 134–141.
12. Alexandrov, D.V., Malygin, A.P. The steady-state solidification scenario of ternary systems: Exact analytical solution of nonlinear model // Int. J. Heat Mass Trans. 2012. **55**. P. 3755–3762.
13. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary // Int. J. Heat Mass Trans. 2006. **49**. P. 763–769.
14. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys // Acta Physica Polonica A. 2009. **115**. P. 795–799.

15. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. The Stefan problem of solidification of ternary systems in the presence of moving phase transition regions // J. Exper. Theor. Phys. 2009. **108**. P. 821–829.
16. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // Int. J. Heat Mass Trans. 2009. **52**. P. 4807–4811.
17. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Analytical description of seawater crystallization in ice fissures and their influence on heat exchange between the ocean and the atmosphere // Dokl. Earth Sci. 2006. **411**. P. 1407–1411.
18. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Solidification of leads: Approximate solutions of non-linear problem // Ann. Glaciol. 2006. **44**. P. 118–122.
19. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. Nonlinear dynamics of the false bottom during seawater freezing // Dokl. Earth Sci. 2008. 419. P. 359–362.
20. Alexandrov D.V., Bashkirtseva I.A., Malygin A.P., Ryashko L.B. Sea ice dynamics induced by external stochastic fluctuations // Pure Appl. Geophys. 2013. **170**. P. 2273–2282.
21. Alexandrov D.V., Netreba A.V., Malygin A.P. Time-dependent crystallization in magma chambers and lava lakes cooled from above: The role of convection and kinetics on nonlinear dynamics of binary systems // Int. J. Heat Mass Trans. 2012. **55**. P. 1189–1196.
22. Alexandrov D.V., Bashkirtseva I.A., Ryashko L.B. Nonlinear dynamics of mushy layers induced by external stochastic fluctuations // Phil. Trans. R. Soc. A. 2018. **376**. Art. no. 20170216.
23. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Alexandrova I.V. Analytical solutions of mushy layer equations describing directional solidification in the presence of nucleation // Phil. Trans. R. Soc. A. 2018. **376**. Art. no. 20170217.
24. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer // Int. J. Heat Mass Trans. 2006. **49**. P. 4903–4909.
25. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics for the solidification of binary melt with a non-equilibrium two-phase zone // Dokl. Phys. 2006. **51**. P. 291–295.
26. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems // Int. J. Heat Mass Trans. 2011. **54**. P. 1144–1149.
27. Batchelor G.K. Transport properties of two-phase materials with random structure // J. Fluid Mech. 1974. **6**. 227–255.

DIRECTIONAL SOLIDIFICATION WITH A TWO-PHASE ZONE WITH ALLOWANCE FOR THE DEPENDENCE OF DENSITY OF THE LIQUID PHASE ON TEMPERATURE AND IMPURITY CONCENTRATION

D. V. Alexandrov[1], I. V. Alexandrova[1], A. A. Ivanov[1], I. O. Starodumov[1], L. V. Toropova[1]

[1]*Ural Federal University, Department of theoretical and mathematical physics, Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Yekaterinburg, Russia*

A quasi-stationary process of directional crystallization of a binary melt with a two-phase region has been studied theoretically. The model takes into account the dependence of the melt density on temperature and impurity concentration. Exact analytical solutions of a nonlinear system of heat and mass transfer equations are obtained. The impurity concentration and temperature profiles, the crystallization rate, and the fraction of the solid phase in the two-phase region are determined. It is shown that with an increase of the initial impurity concentration in the melt, the width of the two-phase region increases.

Keywords: phase transitions, directional crystallization, two-phase region

REFERENCES

1. Flemings M. Solidification Processing. N.Y.: McGraw Hill. 1974.
2. Chalmers B. Principles of Solidification. N.Y.: Wiley. 1964.
3. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem // Int. J. Heat Mass Trans. 2007. **50**. P. 3616–3623.
4. Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of Solidification // Aedermannsdorf: Trans. Tech. Publ. 1989.
5. Alexandrov D.V., Aseev D.L. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // Comp. Mater. Sci. 2006. **37**. P. 1–6.

6. Borisov V.T. Teoriya dvukhfaznoy zony metallicheskogo slitka [Theory of a two-phase zone of a metal ingot] M .: Metallurgiya. 1987. (In Russian).

7. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // Q. J. Appl. Maths. 1983. **36**. P. 505–539.

8. Fowler A.C. The formation of freckles in binary alloys // IMA J. Appl. Math. 1985. **35**. P. 159–174.

9. Alexandrov D.V., Aseev D.L. One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: Thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // J. Fluid Mech. 2005. **527**. P. 57–66.

10. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection // Acta Mater. 2006. **54**. P. 2401–2406.

11. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth // Phys. Earth Planet. Inter. 2011. **189**. P. 134–141.

12. Alexandrov, D.V., Malygin, A.P. The steady-state solidification scenario of ternary systems: Exact analytical solution of nonlinear model // Int. J. Heat Mass Trans. 2012. **55**. P. 3755–3762.

13. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary // Int. J. Heat Mass Trans. 2006. **49**. P. 763–769.

14. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys // Acta Physica Polonica A. 2009. **115**. P. 795–799.

15. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. The Stefan problem of solidification of ternary systems in the presence of moving phase transition regions // J. Exper. Theor. Phys. 2009. **108**. P. 821–829.

16. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // Int. J. Heat Mass Trans. 2009. **52**. P. 4807–4811.

17. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Analytical description of seawater crystallization in ice fissures and their influence on heat exchange between the ocean and the atmosphere // Dokl. Earth Sci. 2006. **411**. P. 1407–1411.

18. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Solidification of leads: Approximate solutions of non-linear problem // Ann. Glaciol. 2006. **44**. P. 118–122.

19. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. Nonlinear dynamics of the false bottom during seawater freezing // Dokl. Earth Sci. 2008. 419. P. 359–362.

20. Alexandrov D.V., Bashkirtseva I.A., Malygin A.P., Ryashko L.B. Sea ice dynamics induced by external stochastic fluctuations // Pure Appl. Geophys. 2013. **170**. P. 2273–2282.

21. Alexandrov D.V., Netreba A.V., Malygin A.P. Time-dependent crystallization in magma chambers and lava lakes cooled from above: The role of convection and kinetics on nonlinear dynamics of binary systems // Int. J. Heat Mass Trans. 2012. **55**. P. 1189–1196.

22. Alexandrov D.V., Bashkirtseva I.A., Ryashko L.B. Nonlinear dynamics of mushy layers induced by external stochastic fluctuations // Phil. Trans. R. Soc. A. 2018. **376**. Art. no. 20170216.

23. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Alexandrova I.V. Analytical solutions of mushy layer equations describing directional solidification in the presence of nucleation // Phil. Trans. R. Soc. A. 2018. **376**. Art. no. 20170217.

24. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer // Int. J. Heat Mass Trans. 2006. **49**. P. 4903–4909.

25. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics for the solidification of binary melt with a nonequilibrium two-phase zone // Dokl. Phys. 2006. **51**. P. 291–295.

26. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems // Int. J. Heat Mass Trans. 2011. **54**. P. 1144–1149.

27. Batchelor G.K. Transport properties of two-phase materials with random structure // J. Fluid Mech. 1974. **6**. 227–255.