

УДК 536.421.4

**К ТЕОРИИ НАПРАВЛЕННОГО ЗАТВЕРДЕВАНИЯ
ПРИ НАЛИЧИИ ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ**

© 2020 г. Д. В. Александров^{а, *}, И. Г. Низовцева^а, И. В. Александрова^а,
А. А. Иванов^а, И. О. Стародумов^а, Л. В. Торопова^а,
О. В. Гусакова^б, В. Г. Шепелевич^с

^аУральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

^бУО “Международный государственный экологический институт им. А.Д. Сахарова”,
Минск, Беларусь

^сБелорусский государственный университет, Минск, Беларусь

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

Поступила в редакцию 25.07.2018 г.

После доработки 12.10.2018 г.

Принята к публикации 11.01.2019 г.

В работе развита модель процесса направленного затвердевания бинарных расплавов с двухфазной зоной, когда доля жидкой фазы описывается пространственно-временной скейлинговой зависимостью. Введены автомодельные переменные с законами роста межфазных границ обратно пропорциональными квадратному корню из времени. Математическая модель процесса переформулирована с использованием автомодельных переменных. Определены точные автомодельные решения уравнений тепломассопереноса при наличии двух подвижных границ фазового перехода: твердая фаза–двухфазная зона и двухфазная зона–жидкая фаза. В виде интегральных выражений найдены распределения температуры и концентрации примеси в твердой фазе, двухфазной области и расплаве. Уменьшение безразмерной температуры охлаждаемой границы приводит к увеличению скорости кристаллизации и повышению доли жидкой фазы. Определены скорость кристаллизации, константы параболического роста и доля жидкой фазы на границе твердая фаза–двухфазная зона в зависимости от скейлингового параметра, а также теплофизических констант затвердевающего расплава. Найдены положения границ фазового перехода между твердой фазой и двухфазной областью, а также двухфазной областью и бинарным расплавом. Проанализированы зависимости для скорости затвердевания (обратно пропорциональные квадратному корню из времени). При этом показано, что скейлинговый параметр существенно влияет на скорость процесса затвердевания и на долю жидкой фазы в области фазового превращения. Развита модель и метод ее решения могут быть обобщены на случай направленного затвердевания многокомпонентных расплавов при наличии нескольких областей фазового превращения (например, основной и котектической двухфазных зон при кристаллизации трехкомпонентных расплавов).

Ключевые слова: фазовые переходы, кристаллизация, двухфазная зона

DOI: 10.31857/S0235010620050023

ВВЕДЕНИЕ

Большое число процессов кристаллизации описывается с помощью классической термодиффузионной модели Стефана с плоской границей раздела фаз между чисто твердым материалом и жидким расплавом [1–5]. Математическая модель процесса

включает в себя уравнения теплопроводности и диффузии растворенной примеси, записываемые в твердой и жидкой фазах, начальные условия, а также граничные условия баланса тепла и массы, непрерывности температуры и скачка концентрации на фронте затвердевания. Однако, при росте твердой фазы происходит вытеснение растворенной примеси в окружающий расплав. При этом интенсивность процесса вытеснения примеси зависит от химического состава растворенных примесей (от расплава, претерпевающего фазовое превращение), а также от скорости кристаллизации в случае высокоскоростного затвердевания [6–9]. С течением времени градиент концентрации примеси (умноженный на коэффициент наклона линии ликвидус) на фронте кристаллизации может превысить температурный градиент, что приведет к возникновению концентрационного переохлаждения [3, 10–13]. Появление переохлажденного слоя расплава перед фронтом затвердевания создает благоприятные условия для развития морфологической неустойчивости, роста выступов твердой фазы вглубь расплава, зарождения и роста элементов твердой фазы [15–23]. Другими словами, перед фронтом кристаллизации образуется область двухфазного состояния вещества – двухфазная зона [24–29]. Процессы роста твердой фазы в такой зоне определяют динамические характеристики процесса кристаллизации и свойства затвердевающего материала. В литературе известно большое количество различных реализаций процесса роста твердого вещества в переохлажденной двухфазной области, которые описываются различными математическими моделями (см., например, [30–39]). В настоящей работе рассматривается теория направленной кристаллизации, когда плотность жидкой фазы в двухфазной области описывается с помощью пространственно-временной скейлинговой зависимости [40].

УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

Рассмотрим процесс направленного затвердевания бинарного расплава вдоль пространственной оси x (рис. 1). Область протекания процесса разделена на три региона: твердую фазу, двухфазную зону и расплав. Обозначим через $\Sigma(\tau)$ и $L(\tau)$ координаты границ областей твердая фаза–двухфазная зона и двухфазная зона–расплав, соответственно. Эти границы движутся вдоль оси x вследствие заданного температурного режима, обеспечивающего процесс затвердевания. Диффузия примеси в двухфазной зоне ($\Sigma(\tau) < x < L(\tau)$) описывается уравнением

$$S \frac{\partial}{\partial \tau} \int_x^{x+\Delta x} c_m(\xi, \tau) \rho(\xi, \tau) d\xi = -[S_l(x + \Delta x, \tau) j(x + \Delta x, \tau) - S_l(x, \tau) j(x, \tau)], \quad (1)$$

где S и S_l – общее поперечное сечение образца и поперечное сечение, занятое жидкой фазой; c_m – концентрация примеси, определенная по жидкой фазе; ρ – объемная доля жидкой фазы в двухфазной области; τ – время. Диффузионный поток \bar{j} определяется классическим законом Фика: $\bar{j} = -D_l \nabla c_m$, где D_l – коэффициент диффузии примеси. Связь между S и S_l будем описывать с помощью простейшего закона: $S_l = S\rho$. Подставляя эту зависимость в уравнение (1), применяя теорему о среднем для преобразования интегрального слагаемого, умножая уравнение на Δx^{-1} и переходя к пределу $\Delta x \rightarrow 0$, получим:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (c_m \rho) = D_l \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial c_m}{\partial x} \right), \quad \Sigma(\tau) < x < L(\tau). \quad (2)$$

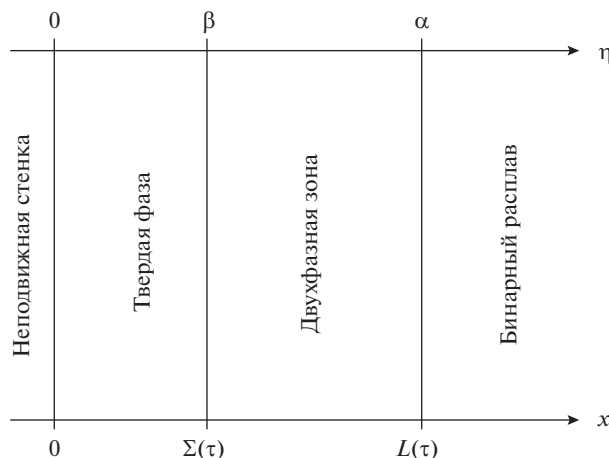


Рис. 1. Схема процесса направленного затвердевания с двухфазной зоной.

Уравнение диффузии в расплаве запишем в традиционном виде

$$\frac{\partial c_l}{\partial \tau} = D_l \frac{\partial^2 c_l}{\partial x^2}, \quad x > L(\tau), \quad (3)$$

где c_l – концентрация примеси в жидкой фазе. Диффузией примеси в твердой фазе будем пренебрегать.

Уравнение теплопроводности в двухфазной зоне выводится аналогично уравнению (2) и имеет вид

$$(C_l \rho_l \rho + C_s \rho_s (1 - \rho)) \frac{\partial \theta_m}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(\rho) \frac{\partial \theta_m}{\partial x} \right), \quad \Sigma(\tau) < x < L(\tau), \quad (4)$$

где θ_m – температура в двухфазной области, $\lambda(\rho) = \lambda_s (1 - \rho) + \lambda_l \rho$, C_l и C_s – теплоемкости в жидкой и твердой фазах, ρ_l и ρ_s – плотности жидкой и твердой фаз, λ_l и λ_s коэффициенты теплопроводности в этих фазах.

Уравнения теплопроводности в затвердевшем материале ($0 < x < \Sigma(\tau)$) и расплаве ($x > L(\tau)$) запишем в виде

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = a_s \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \Sigma(\tau), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial \tau} = a_l \frac{\partial^2 \theta_l}{\partial x^2}, \quad x > L(\tau), \quad (6)$$

где θ_s и θ_l – температуры твердой и расплавленной фаз, a_s и a_l – коэффициенты температуропроводности в этих фазах.

В качестве граничного условия на твердой поверхности $x = 0$ возьмем условие фиксированной температуры, т.е.

$$\theta_s = \theta_0, \quad x = 0. \quad (7)$$

На поверхности между твердой фазой и двухфазной зоной, имеем граничные условия непрерывности температуры, баланса тепла и массы

$$\theta_s = \theta_m = \theta^* - mc_m, \quad (1-k)c_m \frac{d\Sigma}{d\tau} = -D_l \frac{\partial c_m}{\partial x}, \quad x = \Sigma(\tau), \quad (8)$$

$$\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial x} - \lambda(\rho) \frac{\partial \theta_m}{\partial x} = \rho L_V \frac{d\Sigma}{d\tau}, \quad x = \Sigma(\tau), \quad (9)$$

где k – коэффициент распределения примеси, L_V – скрытая теплота затвердевания, θ^* – температура фазового перехода чистого (без примеси) расплава, m – наклон линии ликвидус.

На границе между двухфазной областью и расплавом выполняются условия непрерывности температуры и концентрации примеси, а также их потоков:

$$\theta_m = \theta_l, \quad c_m = c_l, \quad \frac{\partial \theta_m}{\partial x} = \frac{\partial \theta_l}{\partial x}, \quad \frac{\partial c_m}{\partial x} = \frac{\partial c_l}{\partial x}, \quad x = L(\tau). \quad (10)$$

Температура ($\theta_{l\infty}$) и концентрация примеси ($c_{l\infty}$) вдали от границы $L(\tau)$ в жидкой фазе считаются заданными, т.е.

$$\theta_l \rightarrow \theta_{l\infty}, \quad c_l \rightarrow c_{l\infty}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (11)$$

Представим объемную долю жидкой фазы в двухфазной области с помощью следующей масштабно-временной скейлинговой зависимости [40, 41]

$$\rho(x) = \left[a \frac{x}{L} + 1 - a \right]^{D-1}, \quad (12)$$

где D – скейлинговый параметр, a – параметр, аппроксимирующий функцию $\rho(x)$. Отметим, что функция $\rho(x)$ может быть определена с помощью модели неравновесной двухфазной зоны [42–44]. Однако такой подход потребует решения очень сложной интегро-дифференциальной модели с движущимися границами.

АВТОМОДЕЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ

Решение модели (2)–(12) будем искать с использованием следующих автомодельных переменных и безразмерных параметров:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{x}{\sqrt{D_l \tau}}, \quad \alpha = \frac{L}{\sqrt{D_l \tau}}, \quad \beta = \frac{\Sigma}{\sqrt{D_l \tau}}, \quad p_s = \frac{\theta_s}{mc_{l\infty}}, \quad p_l = \frac{\theta_l}{mc_{l\infty}}, \quad p_m = \frac{\theta_m}{mc_{l\infty}}, \\ q_l &= \frac{c_l}{c_{l\infty}}, \quad q_m = \frac{c_m}{c_{l\infty}}, \quad p_0 = \frac{\theta_0}{mc_{l\infty}}, \quad \Lambda = \frac{\lambda_s}{\lambda_l}, \quad p^* = \frac{\theta^*}{mc_{l\infty}}, \quad p_{l\infty} = \frac{\theta_{l\infty}}{mc_{l\infty}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Интегрируя уравнения (2)–(6) в переменных (13) и переписывая с их помощью условия (7)–(11), получим

$$q_m(\eta) = C_1 + C_2 \int_{\beta}^{\eta} \frac{\exp(-y^2/4)}{\rho(y)} dy, \quad \beta < \eta < \alpha, \quad (14)$$

$$p_m(\eta) = C_5 + C_6 \int_{\beta}^{\eta} \frac{J(y) dy}{g(y)}, \quad \beta < \eta < \alpha, \quad (15)$$

$$q_l(\eta) = C_3 + C_4 \int_{\alpha}^{\eta} \exp(-y^2/4) dy, \quad \eta > \alpha, \quad (16)$$

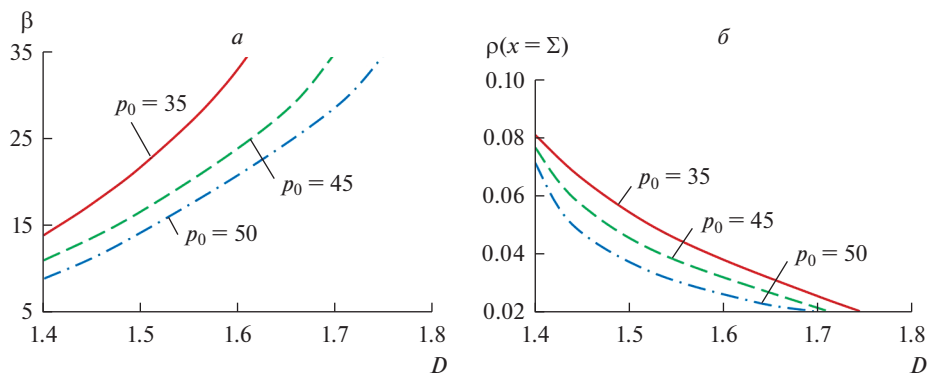


Рис. 2. Зависимости константы параболического роста β и доли жидкой фазы ρ на границе твердая фаза–двухфазная зона (при $x = \Sigma$ или $\eta = \beta$) от скейлингового параметра D для сплава Al–Cu (4 мас. % Cu): $k = 0.17$, $\Lambda = 2.32$, $a = 1$, $G = 0.01$, $p^* = 66$, $\epsilon_l = \epsilon_s = 10^{-4}$, $\alpha = 7071$, $p_{l\infty} = 100$.

$$p_s(\eta) = p_0 + C_7 \int_0^\eta \exp\left(-\frac{\epsilon_s y^2}{4}\right) dy, \quad 0 < \eta < \beta, \tag{17}$$

$$p_l(\eta) = C_8 + C_9 \int_\alpha^\eta \exp\left(-\frac{\epsilon_l y^2}{4}\right) dy, \quad \eta > \alpha. \tag{18}$$

Здесь введены следующие обозначения: $\epsilon_s = D_l/a_s$, $\epsilon_l = D_l/a_l$,

$$\rho(y) = \left[a \frac{y}{\alpha} + 1 - a \right]^{D-1}, \quad g(y) = \rho(y) + \Lambda [1 - \rho(y)],$$

$$J(y) = \exp\left[-\frac{D_l}{2a_l} \int_0^y \frac{[\rho(y) + \Lambda a_l a_s^{-1} (1 - \rho(y))] y dy}{g(y)} \right].$$

Произвольные постоянные C_i ($i = 1 \dots 9$) и параметр β определяются следующими граничными условиями:

$$p_s = p_m = p^* - q_m, \quad \frac{(1-k)\beta q_m}{2} = -\frac{dq_m}{d\eta}, \quad \eta = \beta, \tag{19}$$

$$\Lambda \frac{dp_s}{d\eta} - [\rho + \Lambda(1-\rho)] \frac{dp_m}{d\eta} = G\rho\beta, \quad G = \frac{L_V D_l}{2\lambda_l m c_{l\infty}}, \quad \eta = \beta, \tag{20}$$

$$p_m = p_l, \quad q_m = q_l, \quad \frac{dp_m}{d\eta} = \frac{dp_l}{d\eta}, \quad \frac{dq_m}{d\eta} = \frac{dq_l}{d\eta}, \quad \eta = \alpha, \tag{21}$$

$$p_l \rightarrow p_{l\infty}, \quad q_l \rightarrow 1, \quad \eta \rightarrow \infty. \tag{22}$$

Таким образом, распределения концентрации примеси и температуры в двухфазной системе определяются решениями (14)–(18), а девять произвольных постоянных и параметр β (который характеризует скорость движения границы между твердой фазой и двухфазной зоной), определяются десятью граничными условиями (19)–(22).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученное аналитическое решение показано на рис. 2–4 для сплавов Al–Cu и Fe–Ni. Рисунки 2а–4а демонстрируют, что скорость движения межфазной границы (скорость

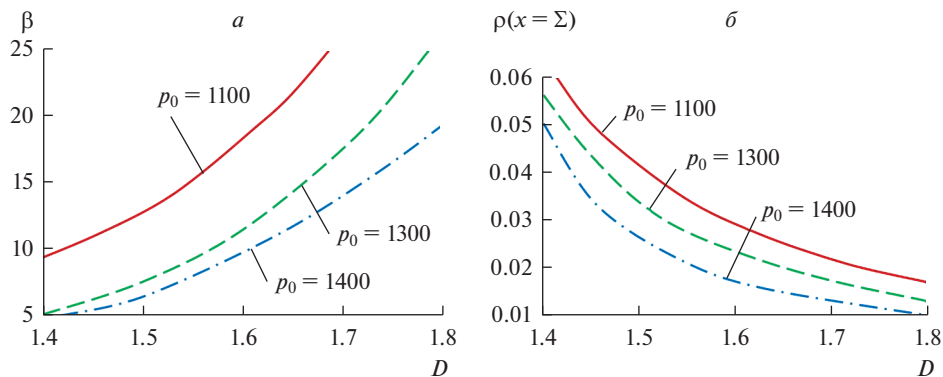


Рис. 3. Зависимости константы параболического роста β и доли жидкой фазы ρ на границе твердая фаза–двухфазная зона (при $x = \Sigma$ или $\eta = \beta$) от скейлингового параметра D для сплава Fe–Ni (0.38 мас. % Ni): $k = 0.68$, $\Lambda = 1.76$, $a = 1$, $G = 0.2$, $p^* = 1529.5$, $\varepsilon_l = \varepsilon_s = 10^{-4}$, $\alpha = 7071$, $p_{l\infty} = 1700$.

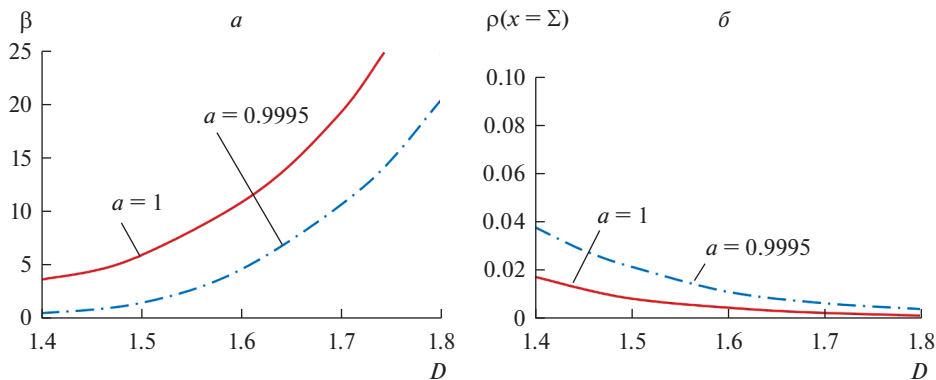


Рис. 4. Зависимости константы параболического роста β и доли жидкой фазы ρ на границе твердая фаза–двухфазная зона (при $x = \Sigma$ или $\eta = \beta$) от скейлингового параметра D для сплава Al–Cu (0.4 мас. % Cu): $k = 0.17$, $\Lambda = 2.32$, $p_0 = 500$, $G = 0.1$, $p^* = 660$, $\varepsilon_l = \varepsilon_s = 10^{-4}$, $\alpha = 7071$, $p_{l\infty} = 800$.

затвердевания $d\Sigma/d\tau = \beta/(2\sqrt{D\tau})$ увеличивается с ростом скейлингового параметра D . Рисунки 2б–4б иллюстрируют, что с ростом скейлингового коэффициента уменьшается объемная доля жидкой фазы на границе $x = \Sigma$ фазового перехода. Это означает, что с ростом D уменьшается свободное пространство между растущими структурами твердого материала. Уменьшение безразмерной температуры p_0 охлаждаемой границы приводит к увеличению скорости кристаллизации (рис. 2а, 3а) и повышает долю жидкой фазы ρ (рис. 2б, 3б). На рис. 4 показано влияние изменения параметра a (определяющего плотность затвердевшего вещества в области фазового превращения) на скорость затвердевания и граничную долю жидкости. С увеличением этого параметра скорость $d\Sigma/d\tau$ увеличивается, а доля жидкой фазы ρ уменьшается при фиксированном значении скейлингового параметра D .

Развиваемая в настоящей работе скейлинговая теория двухфазной зоны, описывающая кристаллизацию двухкомпонентных расплавов, может быть обобщена на затвердевание трехкомпонентных систем с основной и котектической двухфазными регионами на основе экспериментальных данных и теории предшествующих исследований [45–50].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-58-00034 Бел_а и БРФФИ в рамках научного проекта № Ф18Р-195.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Любов Б.Я. Теория кристаллизации в больших объемах. Москва: Наука. 1975.
2. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне. 1980.
3. Buvevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. New York: Begell House. 2001.
4. Alexandrov D.V., Galenko P.K. Boundary integral approach for propagating interfaces in a binary non-isothermal mixture // *Physica A*. 2017. **469**. P. 420–428.
5. Galenko P.K., Alexandrov D.V., Titova E.A. The boundary integral theory for slow and rapid curved solid/liquid interfaces propagating into binary systems // *Phil. Trans. R. Soc. A*. 2018. **378**. P. 20170218.
6. Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of solidification // Aedermannsdorf: Trans. Tech. Publ. 1989.
7. Galenko P.K. Rapid advancing of the solid-liquid interface in undercooled alloys // *Mater. Sci. Eng. A*. 2004. **375–377**. P. 493–497.
8. Galenko P.K., Danilov D.A., Alexandrov D.V. Solute redistribution around crystal shapes growing under hyperbolic mass transport // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2015. **89**. P. 1054–1060.
9. Alexandrov D.V., Galenko P.K. Selected mode for rapidly growing needle-like dendrite controlled by heat and mass transport // *Acta Mater*. 2017. **137**. P. 64–70.
10. Иванцов Г.П. “Диффузионное” переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // Доклады АН СССР. 1951. **LXXXI**. С. 179–182.
11. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary // *J. Fluid. Mech*. 1986. **167**. P. 481–501.
12. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification // *Int. J. Fluid Mech. Research*. 1999. **26**. P. 248–264.
13. Alexandrov D.V. On the theory of the formation of the two-phase concentration-supercooling region // *Doklady Physics*. 2003. **48**. P. 481–486.
14. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy // *J. Appl. Phys*. 1964. **35**. P. 444–451.
15. Sekerka R.F. Morphological stability // *J. Cryst. Growth*. 1968. **3–4**. P. 71–81.
16. Delves R.T. The theory of the stability of the solid-liquid interface under constitutional supercooling (II) // *Phys. Stat. Sol*. 1966. **17**. P. 119–130.
17. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability // *J. Cryst. Growth*. 2000. **210**. P. 797–810.
18. Alexandrov D.V. Self-similar solidification: morphological stability of the regime // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2004. **47**. P. 1383–1389.
19. 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 Transfer*. 2011. **54**. P. 1144–1149.
20. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Transient nucleation kinetics of crystal growth at the intermediate stage of bulk phase transitions // *J. Phys. A: Math. Theor*. 2013. **46**. P. 455101.
21. Alexandrov D.V. Nucleation and crystal growth in binary systems // *J. Phys. A: Math. Theor*. 2014. **47**. P. 125102.
22. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. Nucleation and particle growth with fluctuating rates at the intermediate stage of phase transitions in metastable systems // *Proc. R. Soc. A*. 2014. **470**. P. 20130647.

23. Alexandrov D.V. On the theory of transient nucleation at the intermediate stage of phase transitions // *Phys. Lett. A*. 2014. **378**. P. 1501–1504.
24. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка // М.: Металлургия. 1987.
25. Flemings M. *Solidification processing* // New York: McGraw Hill. 1974.
26. Chalmers B. *Principles of solidification* // New York: Wiley. 1964.
27. Herlach D., Galenko P., Holland-Moritz D. *Metastable solids from undercooled melts* // Amsterdam: Elsevier. 2007.
28. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // *Q. J. Appl. Math.* 1983. **36**. P. 505–539.
29. Fowler A.C. The formation of freckles in binary alloys // *IMA J. Appl. Math.* 1985. **35**. P. 159–174.
30. 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.
31. Martin S., Kauffman P. The evolution of under-ice melt ponds, or double diffusion at the freezing point // *J. Fluid Mech.* 1974. **64**. P. 507–527.
32. Worster M.G. Convection in mushy layers // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1997. **29**. P. 91–122.
33. Schulze T.P., Worster M.G. A time-dependent formulation of the mushy-zone free-boundary problem // *J. Fluid Mech.* 2005. **541**. P. 193–202.
34. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2006. **49**. P. 763–769.
35. Kerr R.C., Woods A.W., Worster M.G., Huppert H.E. Solidification of an alloy cooled from above. Part I. Equilibrium growth // *J. Fluid Mech.* 1990. **216**. P. 323–342.
36. 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.
37. Jones D.W.R., Worster M.G. Fluxes through steady chimneys in a mushy layer during binary alloy solidification // *J. Fluid Mech.* 2013. **714**. P. 127–151.
38. 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**. P. 20170216.
39. 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**. P. 20170217.
40. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Scaling properties of a two-phase zone in directed crystallization // *Doklady Physics*. 2002. **47**. P. 499–503.
41. Vicsek T. *Fractal growth phenomena* // Singapore: World Scientific. 1989.
42. Mansurov V.V. The nonlinear dynamics of solidification of a binary melt with a nonequilibrium mushy region // *Math. Comput. Modell.* 1990. **14**. P. 819–821.
43. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a nonequilibrium mushy layer // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2006. **49**. P. 4903–4909.
44. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics for the solidification of binary melt with a non-equilibrium two-phase zone // *Phys. Dokl.* 2006. **51**. P. 291–295.
45. Aitta A., Huppert H.E., Worster M.G. Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from a cooled boundary // *J. Fluid Mech.* 2001. **432**. P. 201–217.
46. Anderson D.M. A model for diffusion-controlled solidification of ternary alloys in mushy layers // *J. Fluid Mech.* 2003. **483**. P. 165–197.
47. 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. Physics*. 2009. **108**. P. 821–829.
48. 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 Transfer*. 2009. **52**. P. 4807–4811.
49. Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics of solidification in three-component systems // *Doklady Physics*. 2008. **53**. P. 471–475.
50. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers // *Heat Mass Transfer*. 2009. **45**. P. 1467–1472.

ON THE THEORY OF DIRECTIONAL SOLIDIFICATION
WITH A PHASE TRANSFORMATION DOMAIN

D. V. Alexandrov¹, I. G. Nizovtseva¹, I. V. Alexandrova¹, A. A. Ivanov¹,
I. O. Starodumov¹, L. V. Toropova², O. V. Gusakova², V. G. Shepelevich³

¹*Ural Federal University named after First President of Russia B.N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia*

²*International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, Minsk, Belarus*

³*Belarusian State University, Minsk, Belarus*

In this paper, a model of the directional solidification process of binary melts with a two-phase zone is developed in which the fraction of the liquid phase is described by the spatio-temporal scaling dependence. Self-similar variables with the growth laws of interphase boundaries, which are inversely proportional to the square root of time, are used. The mathematical model of the process is reformulated using the self-similar variables. Exact self-similar solutions to the heat and mass transfer equations are determined in the presence of two moving boundaries of the phase transition: solid phase—two-phase zone and two-phase zone—liquid phase. The distributions of temperature and impurity concentration in the solid phase, two-phase region, and melt are found in the form of integral expressions. A decrease in the dimensionless temperature of the cooled boundary leads to an increase in the crystallization rate and an increase in the liquid phase fraction. The crystallization rate, parabolic growth constants, and the liquid phase fraction at the solid-phase—two-phase zone are determined depending on the scaling parameter and the thermophysical constants of the solidified melt. The positions of the phase transition boundaries between the solid phase and the two-phase region, as well as the two-phase region and the binary melt, are found. The dependences for the solidification rate (inversely proportional to the square root of time) are analyzed. It was shown that the scaling parameter significantly affects the rate of the solidification process and the liquid phase fraction in the phase transformation region. The developed model and the method of its solution can be generalized to the case of directional solidification of multicomponent melts in the presence of several regions of phase transformation (for example, the main and cotectic two-phase zones during crystallization of three-component melts).

Keywords: phase transitions, crystallization, two-phase zone

REFERENCES

1. Lubov B.Y. Teoriya kristallizatsii v bol'shikh ob'yemakh [Crystallization theory in large volumes]. Moscow: Nauka. 1975. [In Russian].
2. Avdonin N.A. Matematicheskoye opisaniye protsessov kristallizatsii [Mathematical description of crystallization processes]. Riga: Zinatne. 1980. [In Russian].
3. Buvevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. New York: Beggell House. 2001.
4. Alexandrov D.V., Galenko P.K. Boundary integral approach for propagating interfaces in a binary non-isothermal mixture // *Physica A*. 2017. **469**. P. 420–428.
5. Galenko P.K., Alexandrov D.V., Titova E.A. The boundary integral theory for slow and rapid curved solid/liquid interfaces propagating into binary systems // *Phil. Trans. R. Soc. A*. 2018. **378**. P. 20170218.
6. Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of solidification // Aedermannsdorf: Trans. Tech. Publ. 1989.
7. Galenko P.K. Rapid advancing of the solid-liquid interface in undercooled alloys // *Mater. Sci. Eng. A*. 2004. **375–377**. P. 493–497.
8. Galenko P.K., Danilov D.A., Alexandrov D.V. Solute redistribution around crystal shapes growing under hyperbolic mass transport // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 2015. **89**. P. 1054–1060.
9. Alexandrov D.V., Galenko P.K. Selected mode for rapidly growing needle-like dendrite controlled by heat and mass transport // *Acta Mater*. 2017. **137**. P. 64–70.

10. Ivantsov G.P. "Diffuzionnoye" pereokhlazhdeniye pri kristallizatsii binarnogo splava ["Diffusion" supercooling during crystallization of a binary alloy] // Doklady AN USSR. 1951. **LXXXI**. P. 179–182. [In Russian].
11. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary // J. Fluid. Mech. 1986. **167**. P. 481–501.
12. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification // Int. J. Fluid Mech. Research. 1999. **26**. P. 248–264.
13. Alexandrov D.V. On the theory of the formation of the two-phase concentration-supercooling region // Doklady Physics. 2003. **48**. P. 481–486.
14. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy // J. Appl. Phys. 1964. **35**. P. 444–451.
15. Sekerka R.F. Morphological stability // J. Cryst. Growth. 1968. **3–4**. P. 71–81.
16. Delves R.T. The theory of the stability of the solid-liquid interface under constitutional supercooling (II) // Phys. Stat. Sol. 1966. **17**. P. 119–130.
17. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability // J. Cryst. Growth. 2000. **210**. P. 797–810.
18. Alexandrov D.V. Self-similar solidification: morphological stability of the regime // Int. J. Heat Mass Transfer. 2004. **47**. P. 1383–1389.
19. 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 Transfer. 2011. **54**. P. 1144–1149.
20. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Transient nucleation kinetics of crystal growth at the intermediate stage of bulk phase transitions // J. Phys. A: Math. Theor. 2013. **46**. P. 455101.
21. Alexandrov D.V. Nucleation and crystal growth in binary systems // J. Phys. A: Math. Theor. 2014. **47**. P. 125102.
22. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. Nucleation and particle growth with fluctuating rates at the intermediate stage of phase transitions in metastable systems // Proc. R. Soc. A. 2014. **470**. P. 20130647.
23. Alexandrov D.V. On the theory of transient nucleation at the intermediate stage of phase transitions // Phys. Lett. A. 2014. **378**. P. 1501–1504.
24. Borisov V.T. Teoriya dvukhfaznoy zony metallichesкого slitka [Theory of a two-phase zone of a metal ingot] // M.: Metallurgia Publishing House. 1987. [In Russian].
25. Flemings M. Solidification processing // New York: McGraw Hill. 1974.
26. Chalmers B. Principles of solidification // New York: Wiley. 1964.
27. Herlach D., Galenko P., Holland-Moritz D. Metastable solids from undercooled melts // Amsterdam: Elsevier. 2007.
28. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // Q. J. Appl. Math. 1983. **36**. P. 505–539.
29. Fowler A.C. The formation of freckles in binary alloys // IMA J. Appl. Math. 1985. **35**. P. 159–174.
30. 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.
31. Martin S., Kauffman P. The evolution of under-ice melt ponds, or double diffusion at the freezing point // J. Fluid Mech. 1974. **64**. P. 507–527.
32. Worster M.G. Convection in mushy layers // Annu. Rev. Fluid Mech. 1997. **29**. P. 91–122.
33. Schulze T.P., Worster M.G. A time-dependent formulation of the mushy-zone free-boundary problem // J. Fluid Mech. 2005. **541**. P. 193–202.
34. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary // Int. J. Heat Mass Transfer. 2006. **49**. P. 763–769.
35. Kerr R.C., Woods A.W., Worster M.G., Huppert H.E. Solidification of an alloy cooled from above. Part I. Equilibrium growth // J. Fluid Mech. 1990. **216**. P. 323–342.
36. 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.

37. Jones D.W.R., Worster M.G. Fluxes through steady chimneys in a mushy layer during binary alloy solidification // *J. Fluid Mech.* 2013. **714**. P. 127–151.
38. 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**. P. 20170216.
39. 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**. P. 20170217.
40. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Scaling properties of a two-phase zone in directed crystallization // *Doklady Physics.* 2002. **47**. P. 499–503.
41. Vicsek T. *Fractal growth phenomena* // Singapore: World Scientific. 1989.
42. Mansurov V.V. The nonlinear dynamics of solidification of a binary melt with a nonequilibrium mushy region // *Math. Comput. Modell.* 1990. **14**. P. 819–821.
43. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a nonequilibrium mushy layer // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2006. **49**. P. 4903–4909.
44. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics for the solidification of binary melt with a nonequilibrium two-phase zone // *Phys. Dokl.* 2006. **51**. P. 291–295.
45. Aitta A., Huppert H.E., Worster M.G. Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from a cooled boundary // *J. Fluid Mech.* 2001. **432**. P. 201–217.
46. Anderson D.M. A model for diffusion-controlled solidification of ternary alloys in mushy layers // *J. Fluid Mech.* 2003. **483**. P. 165–197.
47. 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. Physics.* 2009. **108**. P. 821–829.
48. 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 Transfer.* 2009. **52**. P. 4807–4811.
49. Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics of solidification in three-component systems // *Doklady Physics.* 2008. **53**. P. 471–475.
50. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers // *Heat Mass Transfer.* 2009. **45**. P. 1467–1472.