



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 64 за 2022 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**А.О. Гусев**

Численное моделирование  
процесса кристаллизации  
трехкомпонентного раствора  
на подвижной сетке

Статья доступна по лицензии  
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Гусев А.О. Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 64. 30 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-64>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-64>

Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
им. М.В. Келдыша  
Российской академии наук

А.О. Гусев

Численное моделирование процесса кристаллизации  
трехкомпонентного раствора на подвижной сетке

Москва — 2022

**Гусев А.О.**

Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке

Рассмотрен процесс кристаллизации трехкомпонентного раствора в прямоугольной ростовой ячейке. Математическая модель учитывает движение границы раздела, массоперенос в растворе, процесс диффузии в кристалле, условия термодинамического равновесия на фронте кристаллизации. Численное моделирование процесса осуществляется на подвижной сетке, согласованной с формой межфазной границы. В расчетах используется консервативная разностная схема, обеспечивающая выполнение на разностном уровне дискретных аналогов законов сохранения кинетической энергии и массы. Вычислительный алгоритм применяется для изучения влияния размеров ростовой камеры на ход процесса кристаллизации.

**Ключевые слова:** фазовый переход; метод жидкофазной эпитаксии; численное моделирование; подвижная сетка

**Gusev A.O.**

Moving grid method for numerical simulation of ternary solution crystallization process

The crystallization process of ternary alloy in the rectangular growth chamber is considered. The mathematical model accounts for crystallization interface movement, convective mass transfer in the solution, diffusion mass transfer in crystal, equilibrium conditions at the phase transition interface. The conservative finite volume scheme is constructed on the boundary-fitted moving grid. The discrete counterparts of conservation laws for kinetic energy and mass are satisfied in the numerical model. The effect of growth chamber dimensions on the crystal composition is studied numerically.

**Key words:** phase transition; liquid phase epitaxy; numerical simulation; moving grid

# 1 Введение

Одним из распространенных способов получения монокристаллических слоев является их выращивание из растворов/расплавов на подложке определенной кристаллографической ориентации (метод жидкофазной эпитаксии). На начальной стадии процесса насыщенный раствор кристаллизующихся компонентов приводится в контакт с подложкой. Затем температуру в ростовой ячейке понижают, жидкая фаза становится пересыщенной, растворенные вещества осаждаются на подложку, происходит рост эпитаксиального слоя. На качество полупроводниковых материалов влияет множество факторов: степень пересыщения раствора, конвективное движение в жидкой фазе, диффузионный перенос компонентов в кристалле, поверхностные процессы, протекающие на межфазной границе [1]. Поэтому для получения материалов с искомыми характеристиками необходимо осуществлять оптимизацию технологического процесса. Одним из инструментов, позволяющих изучать режимы выращивания, является математическое моделирование.

Изменение объема жидкой фазы за счет образования кристаллического слоя является незначительным и не оказывает существенного влияния на массоперенос в растворе. Поэтому моделирование процесса выращивания тонких пленок, как правило, сводится к расчету течений, возникающих в жидкой фазе [2–6]. Однако известно, что без учета движения границы раздела и диффузионного массопереноса в кристалле невозможно построить самосогласованную математическую модель процесса, описывающую как рост, так и растворение материала [7]. При этом для получения надежных результатов в расчетах необходимо определять положение межфазной границы и аппроксимировать условия термодинамического равновесия на ней с высокой точностью [7, 8].

В данной работе рассмотрен процесс кристаллизации трехкомпонентного раствора в прямоугольной ростовой ячейке. Математическая модель учитывает движение границы раздела, массоперенос в растворе, процесс диффузии в кристалле; на фронте кристаллизации выполнены условия термодинамического равновесия. Численное моделирование процесса осуществляется на подвижной сетке, согласованной с формой межфазной границы. В расчетах используется

консервативная разностная схема, в которой на разностном уровне выполняются дискретные аналоги законов сохранения кинетической энергии и массы. Вычислительный алгоритм применяется для изучения влияния размеров ростовой камеры на ход процесса кристаллизации.

## 2 Постановка задачи

В работе рассматривается процесс кристаллизации трехкомпонентного соединения в прямоугольной ростовой ячейке. На начальной стадии процесса насыщенный раствор компонентов **A** и **B** в веществе **C** приводится в контакт с кристаллом-подложкой. Затем температуру в области понижают, раствор вблизи границы раздела становится пересыщенным, происходит рост монокристаллического слоя.

Моделирование процесса кристаллизации осуществляется в декартовой системе координат  $Oxy$ , в прямоугольной области  $\Omega = [0, H_1] \times [0, H_2]$ , состоящей из двух подобластей — твердой фазы  $\Omega^{cr}$  и жидкой фазы  $\Omega^{lq}$  (рис. 1). Положение границы раздела описывается функцией  $y = \zeta(t, x)$ ,  $0 \leq x \leq H_1$ . Предполагается, что раствор является вязкой несжимаемой жидкостью, температура в области однородна по пространству и изменяется во времени.

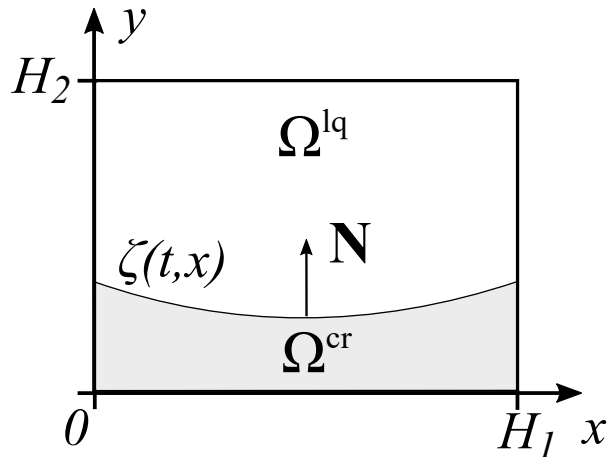


Рис. 1: Ростовая ячейка.

Твердая фаза является твердым раствором  $A_x B_{1-x} C$ , где  $x$  — мольная доля компонента **AC**. При этом мольная доля каждого из компонентов удовлетворяет

соотношению

$$x^{\text{cr}(\text{AC})} = x, \quad x^{\text{cr}(\text{BC})} = 1 - x.$$

Состав жидкой фазы определяется концентрациями компонентов **A** и **B**, а концентрация вещества **C** вычисляется из условия

$$x^{\text{lq}(\text{A})} + x^{\text{lq}(\text{B})} + x^{\text{lq}(\text{C})} = 1,$$

где  $x^{\text{lq}(m)}$   $m = \text{A}, \text{B}, \text{C}$  — мольная доля соответствующего компонента.

Уравнения, описывающие процессы в системе, рассматриваются в безразмерной форме. В качестве пространственного масштаба используется высота ростовой ячейки  $H_2$ , временной масштаб  $t_\nu = H_2^2/\nu$ , где  $\nu$  — кинематическая вязкость раствора. Безразмерная концентрация в твердой и жидкой фазах определяется соотношением  $C^{(m)} = C^{(m),d}/\Delta C^{(m),d}$ , где  $C^{(m),d}$  — размерная концентрация компонента  $m$  [моль/см<sup>3</sup>],  $\Delta C^{(m),d}$  — характерный перепад концентрации компонента в жидкой фазе. Коэффициент диффузии компонента  $m$  нормируется на соответствующее значение в жидкой фазе:  $D^{q(m)} = D^{q(m)}/D^{\text{lq}(m)}$ ,  $q = \text{lq}; \text{cr}$ . В модели используются следующие безразмерные параметры:

$$\text{Ra}^{(m)} = \frac{g\beta^{(m)}\Delta C^{(m),d}H_2^3}{\nu D^{\text{lq}(m)}}, \quad \text{Sc}^{(m)} = \frac{\nu}{D^{\text{lq}(m)}}, \quad \text{Gr}^{(m)} = \frac{\text{Ra}^{(m)}}{\text{Sc}^{(m)}}, \quad m = \text{A}, \text{B}.$$

Здесь  $\text{Ra}$  — число Рэлея,  $\text{Sc}$  — число Шмидта,  $\text{Gr}$  — число Грасгофа,  $g$  — модуль ускорения свободного падения,  $\beta^{(m)}$  — коэффициент концентрационного расширения,  $m = \text{A}, \text{B}$ .

Движение раствора–расплава описывается уравнениями Навье–Стокса в переменных «функция тока–завихренность»:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathcal{K}(\omega, \psi) = \mathcal{D}(\omega) + \text{Gr}^{(\text{A})} \frac{\partial C^{\text{lq}(\text{A})}}{\partial x} + \text{Gr}^{(\text{B})} \frac{\partial C^{\text{lq}(\text{B})}}{\partial x}, \quad (1)$$

$$-\omega = \mathcal{D}(\psi), \quad (2)$$

уравнение конвективного массопереноса в декартовой системе координат имеет

вид:

$$\frac{\partial C^{\text{лq}(m)}}{\partial t} + \mathcal{K}(C^{\text{лq}(m)}, \psi) = \mathcal{D}(C^{\text{лq}(m)}), \quad m = \text{A, B}. \quad (3)$$

Здесь  $\omega$  — завихренность,  $\psi$  — функция тока,  $C^{\text{лq}(m)}$  — концентрация компонента  $m$  в жидкой фазе,  $\mathcal{K}$  — оператор, описывающий конвективный перенос:

$$\mathcal{K}(f, \psi) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y, \quad f = \omega, C^{\text{лq}(m)}, \quad (4)$$

где конвективный поток  $\mathcal{H} = (\mathcal{H}^x, \mathcal{H}^y)$  выражается формулами

$$\mathcal{H}^x(f) = \frac{\partial \psi}{\partial y} f, \quad \mathcal{H}^y(f) = -\frac{\partial \psi}{\partial x} f; \quad (5)$$

$\mathcal{D}$  — эллиптический оператор, описывающий диссипативные процессы в уравнениях переноса завихренности и массопереноса:

$$\mathcal{D}(f) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y, \quad f = \omega, \psi, C^{\text{cr(A)}}, C^{\text{лq}(m)}; \quad (6)$$

диссипативный поток  $\mathcal{W} = (\mathcal{W}^x, \mathcal{W}^y)$ :

$$\mathcal{W}^x(f) = \varkappa \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \mathcal{W}^y(f) = \varkappa \frac{\partial f}{\partial y}, \quad (7)$$

где  $\varkappa = 1$  при  $f = \psi, \omega$  и  $\varkappa = D^{(m)}/Sc^{(m)}$  при  $f = C^{(m)}$ .

Диффузионный перенос компонента  $A$  в кристалле описывается уравнением

$$\frac{\partial C^{\text{cr(A)}}}{\partial t} = \mathcal{D}(C^{\text{cr(A)}}). \quad (8)$$

Содержание компонента  $B$  в твердой фазе определяется уравнением

$$(a_A + a_C)C^{\text{cr(A),d}} + (a_B + a_C)C^{\text{cr(B),d}} = \rho^{\text{cr}}, \quad (9)$$

где  $a_m$  — атомные веса компонентов,  $\rho^{\text{cr}}$  — плотность кристалла.

Граничные условия для функции тока на стенках ростовой камеры и фронте

кристаллизации:

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (10)$$

Здесь  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}$  — производная по направлению нормали к соответствующей границе. Стенки области непроницаемы для вещества, т.е.

$$\mathbf{D}^m \frac{\partial C^{q(m)}}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad q = \text{cr}, \text{lq}, \quad m = \text{A}, \text{B}. \quad (11)$$

На границе раздела  $y = \zeta(t, x)$  выполнены:

- Условия фазового равновесия

$$F_n(T, C_{\text{ph}}^{\text{cr}(\text{A})}, C_{\text{ph}}^{\text{lq}(\text{A})}, C_{\text{ph}}^{\text{cr}(\text{B})}, C_{\text{ph}}^{\text{lq}(\text{B})}) = 0, \quad n = 1, 2, 3. \quad (12)$$

Здесь  $T = T(t)$  — температура в области,  $C_{\text{ph}}^{\text{lq}(m)}$  и  $C_{\text{ph}}^{\text{cr}(m)}$  — концентрации компонента  $m$  на фронте кристаллизации в твердой и жидкой фазах,

- Закон сохранения массы для компонентов **A** и **B**

$$\frac{1}{S_c} \left[ \left( \mathbf{D}^{(m)} \nabla C^{(m)} \cdot \mathbf{N} \right) \right] = -(C_{\text{ph}}^{\text{cr}(m)} - C_{\text{ph}}^{\text{lq}(m)}) v_{\text{ph}} (\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{N}). \quad (13)$$

Здесь  $\llbracket f \rrbracket = f^{\text{cr}} - f^{\text{lq}}$  — скачок величины  $f$  на фронте кристаллизации,  $v_{\text{ph}} = d\zeta/dt$  — скорость движения границы раздела фаз,  $\mathbf{N}$  — единичная нормаль к фронту кристаллизации, направленная в жидкую фазу,  $\mathbf{e}_y$  — единичный вектор в направлении оси  $y$ .

Далее, там, где это не вызывает разночтений, будем опускать у концентрации верхние индексы, указывающие на вещество и принадлежность фазе.

### 3 Вычислительный алгоритм

Консервативная разностная схема для задачи (1)–(13) строится на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз.



### 3.1 Сетка и сеточные функции

Введем в физической области  $\Omega$  подвижную сетку  $\omega_h(t) = \{(x_i, y_j(t, x_i)), i = \overline{0, M}, j = \overline{0, N}\}$ , таким образом, чтобы  $y_0(t, x_i) = 0$ ,  $y_N(t, x_i) = H_2$ ,  $y_{j^*}(t, x_i) = \zeta(t, x_i)$  для любого  $x_i$ . Сетка по времени  $\omega_\tau = \{t_0=0, t_{k+1}=t_k+\tau, k = 0, 1, \dots\}$ , где  $\tau$  — шаг по времени. Движение узлов сетки  $\omega_h(t)$  определяется выражением

$$y_j(t_{k+1}, x_i) = y_j(t_k, x_i) + \tau v_j^y(x_i), \quad v_j^y(x_i) = \begin{cases} \frac{y_j}{\zeta_i} v_i^{\text{ph}}, & 0 < j \leq j^*, \\ \frac{H_2 - y_j}{H_2 - \zeta_i} v_i^{\text{ph}}, & j^* < j < N. \end{cases} \quad (14)$$

Введем также потоковые узлы с координатами  $(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}(t, x_{i+1/2}))$ , где

$$x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2, \quad y_j(t, x_{i+1/2}) = [y_j(t, x_i) + y_j(t, x_{i+1})]/2,$$

$$y_{j+1/2}(t, x_{i+1/2}) = [y_{j+1}(t, x_{i+1/2}) + y_j(t, x_{i+1/2})]/2.$$

Шаги подвижной сетки равны

$$h_{i+1/2}^x = x_{i+1} - x_i, \quad h_{i,j+1/2}^y(t_k) = y_{j+1}(t_k, x_i) - y_j(t_k, x_i),$$

$$h_{i+1/2,j+1/2}^y(t_k) = y_{j+1}(t_k, x_{i+1/2}) - y_j(t_k, x_{i+1/2}), \quad \bar{h}_i^x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2},$$

$$\bar{h}_{i+1/2,j}^y(t_k) = y_{j+1/2}(t_k, x_{i+1/2}) - y_{j-1/2}(t_k, x_{i+1/2}).$$

В общем случае  $h_{i,j+1/2}^y \neq h_{i+1/2,j+1/2}^y \neq h_{i+1,j+1/2}^y$ .

Сетка  $\omega_h(t)$  разбивает физическую область на четырёхугольные ячейки  $S_{i+1/2,j+1/2}(t)$  с вершинами в точках  $(x_{i+\alpha}, y_{j+\beta}(t, x_{i+\alpha}))$ ,  $\alpha, \beta = 0, 1$ . Соединим середины противоположащих границ данных ячеек отрезками прямых. Полученные отрезки разбивают область на шестиугольные ячейки  $S_{ij}(t)$ ,  $i = \overline{0, M}, j = \overline{0, N}$  (заштрихованная область на рис. 2). Сеточную функцию  $f_{ij}^k = f(t_k, x_i, y_j)$  будем относить к узлам сетки  $\omega_h(t)$ . Доопределим эту функцию внутри расчетных ячеек:  $f(t_k, x_i, y_j) = f_{ij}^k$  при  $(x, y(t)) \in S_{ij}(t)$ . Физические параметры относятся к центрам ячеек  $S_{i+1/2,j+1/2}$ .

Далее для обозначения узлов сетки будем использовать локальную геогра-

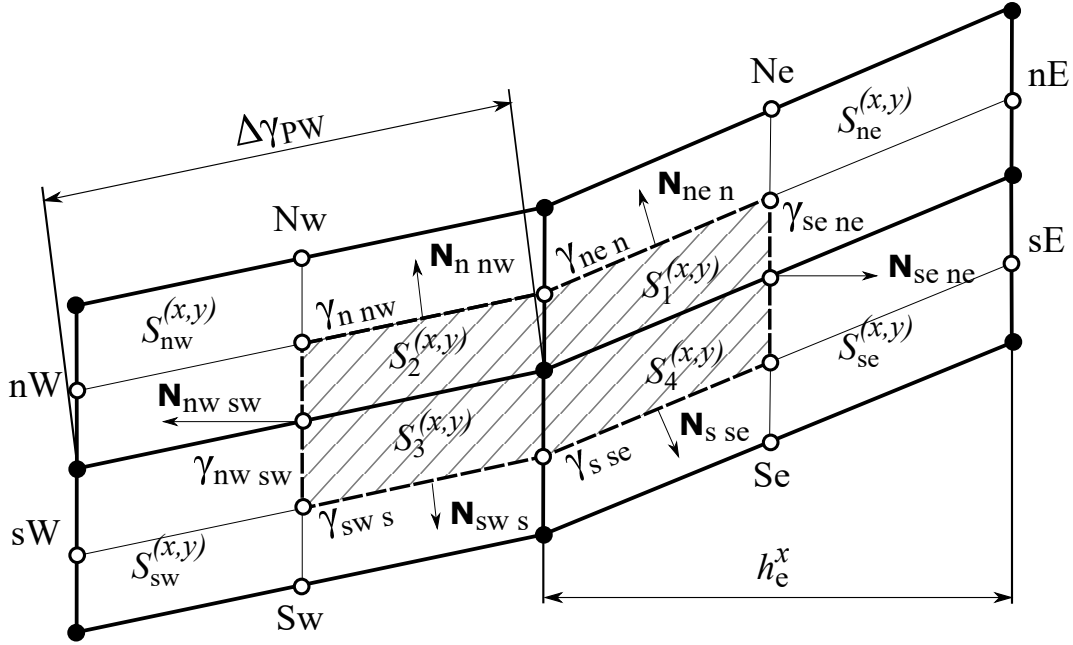


Рис. 2: Подвижная сетка.

фическую нотацию [9]. Обозначим  $S_p = \bigcup_{q=1}^4 S_q$  (рис. 2) и  $dS_q$  — площадь ячейки  $S_q$ . Границу ячейки  $S_p$  будем считать положительно ориентированной и введем упорядоченное в соответствии с ориентацией границы множество вершин  $V = \{ne, n, nw, sw, s, se\}$ . Пусть  $\gamma_{\alpha\beta}$  — участок границы ячейки с началом в точке  $\alpha$  и концом в точке  $\beta$  ( $\alpha, \beta \in V$ );  $\Delta\gamma_{\alpha\beta}$  — длина отрезка  $\gamma_{\alpha\beta}$ ,  $\Delta\gamma_{\alpha\beta} = \sqrt{\delta x_{\alpha\beta}^2 + \delta y_{\alpha\beta}^2}$ , где  $\delta x_{\alpha\beta} = x_\beta - x_\alpha$ ,  $\delta y_{\alpha\beta} = y_\beta - y_\alpha$ ;  $N_{\alpha\beta}$  — вектор внешней единичной нормали к границе  $\gamma_{\alpha\beta}$  с координатами  $(N_{\alpha\beta}^x, N_{\alpha\beta}^y)$ ,  $\mu_{\alpha\beta}$  — единичный направляющий вектор границы,  $(\mu_{\alpha\beta}^x, \mu_{\alpha\beta}^y)$ . В нашем случае

$$\mu_{\alpha\beta}^x = -N_{\alpha\beta}^y, \quad \mu_{\alpha\beta}^y = N_{\alpha\beta}^x, \quad (15)$$

где  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta} / \Delta\gamma_{\alpha\beta}$ ,  $N_{\alpha\beta}^y = -\delta x_{\alpha\beta} / \Delta\gamma_{\alpha\beta}$ .

Производная вдоль участка границы  $\gamma_{\alpha\beta}$  вычисляется по формуле

$$f_{\mu_{\alpha\beta}} = (f_\beta - f_\alpha) / \Delta\gamma_{\alpha\beta}.$$

Наряду с множеством  $V$ , введем упорядоченное множество

$$\tilde{V} = \{nE, n, nW, sW, s, sE\},$$

образованное серединами вертикальных границ ячеек основной сетки  $S_\nu$ ,  $\nu \in \{\text{ne}, \text{nw}, \text{sw}, \text{se}\}$ . Доопределим функцию  $f$  в серединах границ ячейки основной сетки  $S_\nu$  как полусумму ее значений на концах соответствующих границ, т.е.  $f_n = 0.5[f_P + f_N]$ ,  $f_{nE} = 0.5[f_E + f_{NE}]$ ,  $f_e = 0.5[f_P + f_E]$ ,  $f_{ne} = 0.5[f_N + f_{NE}]$  и т.д; значение искомой функции в центре ячейки основной сетки  $S_\nu$  равно среднему значению, вычисленному по значениям  $f$  в вершинах данной ячейки, т.е.  $f_{ne} = 0.25[f_P + f_E + f_N + f_{NE}]$  и т.д. При такой переинтерполяции на «северных» и «южных» границах ячейки  $S_P$  для сонаправленных  $\mu_{\alpha\beta}$  и  $\mu_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}$ ,  $\alpha, \beta \in V$ ,  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta} \in \tilde{V}$  имеем

$$f_{\mu_{\alpha\beta}} = f_{\mu_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}} = (f_{\tilde{\beta}} - f_{\tilde{\alpha}})/(2\Delta\gamma_{\alpha\beta}), \quad (16)$$

например,  $f_{\mu_{ne n}} = (f_n - f_{nE})/(2\Delta\gamma_{ne n}) = ([f_P + f_N] - [f_{NE} + f_E])/(4\Delta\gamma_{ne n})$ . Производную  $\partial_y f$  в центрах ячеек основной сетки  $S_\nu$  аппроксимируем следующим образом

$$[\partial_y f]_{ne}^h = f_{e,y} = \frac{f_{Ne} - f_e}{h_{ne}^y}, \quad [\partial_y f]_{se}^h = f_{e,\bar{y}} = \frac{f_e - f_{Se}}{h_{se}^y}, \quad [\partial_y f]_{nw}^h = f_{w,y}, \quad [\partial_y f]_{sw}^h = f_{w,\bar{y}}. \quad (17)$$

Остальные разностные аппроксимации пространственных производных на подвижной сетке вычисляются стандартным образом.

## 3.2 Построение разностной схемы

Разностную схему будем строить интегро–интерполяционным методом (методом конечных объемов) [10,11]. Проинтегрируем эволюционные уравнения (1), (3) и (8) по контрольному объему  $S_P(t)$  и отрезку времени  $[t_k, t_{k+1}]$ :

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_P(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy dt + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_P(t)} \mathcal{K}(f, \psi) dx dy dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_P(t)} \mathcal{D}(f) dx dy dt. \quad (18)$$

Построим пространственную аппроксимацию **диссипативных членов**

$$\mathcal{D}_P(f) dS_P = \int_{S_P(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y \right] dx dy.$$

Из формулы Остроградского — Гаусса имеем

$$\int_{S_P(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y \right] dx dy = \sum_{\alpha, \beta \in V} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \mathcal{W}^x N_{\alpha\beta}^x + \mathcal{W}^y N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma. \quad (19)$$

Вычислим интегралы вдоль «горизонтальных» границ  $\gamma_{ne n}$ ,  $\gamma_{nw}$ ,  $\gamma_{sw}$ ,  $\gamma_{se}$ . Воспользуемся тем, что

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{\mu_{\alpha\beta}^x} \left( \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} - \mu_{\alpha\beta}^y \frac{\partial f}{\partial y} \right). \quad (20)$$

Используя (20), перепишем интеграл вдоль границы следующим образом

$$\begin{aligned} & \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} N_{\alpha\beta}^x + \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \\ & = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^x}{\mu_{\alpha\beta}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma + \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^y - \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^x \right] \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma. \end{aligned} \quad (21)$$

Для первого слагаемого в (21), с учетом соотношения (15), получим

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^x}{\mu_{\alpha\beta}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} -\frac{N_{\alpha\beta}^x}{N_{\alpha\beta}^y} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma \approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left( \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{\delta x_{\alpha\beta}} [\varkappa]^h f_{\mu_{\alpha\beta}} \right).$$

Для второго слагаемого в (21) имеем

$$\begin{aligned} & \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^y - \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^x \right] \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{(N_{\alpha\beta}^x)^2 + (N_{\alpha\beta}^y)^2}{N_{\alpha\beta}^y} \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{1}{N_{\alpha\beta}^y} \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma \approx \\ & \approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left( -\frac{\Delta\gamma_{\alpha\beta}}{\delta x_{\alpha\beta}} [\varkappa]^h [\partial_y f]_P^h \right) = -\delta x_{\alpha\beta} \left[ 1 + (\delta y_{\alpha\beta} / \delta x_{\alpha\beta})^2 \right] [\varkappa]^h [\partial_y f]_P^h. \end{aligned}$$

Здесь  $[\varkappa]^h = \varkappa_{ne}$  для  $\gamma_{ne n}$ ,  $[\varkappa]^h = \varkappa_{nw}$  для  $\gamma_{nw}$ ,  $[\varkappa]^h = \varkappa_{se}$  для  $\gamma_{se}$  и  $[\varkappa]^h = \varkappa_{sw}$  для  $\gamma_{sw}$ ;  $[\partial_y f]_P^h$  — разностная аппроксимация  $\partial_y f$ ,  $[\partial_y f]_P^h = f_{P,y}$  для «северных» границ  $\gamma_{ne n}$  и  $\gamma_{nw}$ ,  $[\partial_y f]_P^h = f_{P,\bar{y}}$  для «южных» границ  $\gamma_{se}$  и  $\gamma_{sw}$ . Поток через «северную» границу можно представить в виде

$$\mathcal{I}_n = 0.5 [h_e^x M_{ne}^{yy} + h_w^x M_{nw}^{yy}] f_{P,y} + \Delta\gamma_{ne n} M_{ne}^{y\mu} f_{n,\mu} + \Delta\gamma_{nw} M_{nw}^{y\bar{\mu}} f_{n,\bar{\mu}}, \quad (22)$$

где  $f_{n,\mu} = -f_{\mu_{ne n}}$ ,  $f_{n,\bar{\mu}} = -f_{\mu_{n nw}}$ , коэффициенты  $M^{yy}$  и  $M^{y\mu}$  вычисляются по формулам

$$M_{ne}^{yy} = \varkappa_{ne} [1 + (y_{n,x})^2], \quad M_{nw}^{yy} = \varkappa_{nw} [1 + (y_{n,\bar{x}})^2], \quad M_{ne}^{y\mu} = \varkappa_{ne} (-y_{n,x}), \quad M_{nw}^{y\mu} = \varkappa_{nw} (-y_{n,\bar{x}}).$$

Формула, аналогичная (22), справедлива для потока  $\mathcal{I}_S$  через южную границу [12].

Запишем интегралы вдоль вертикальных границ  $\gamma_{nwsw}$  и  $\gamma_{sene}$ . В этом случае  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta} / |\delta y_{\alpha\beta}|$ ,  $N_{\alpha\beta}^y = 0$  и

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} N_{\alpha\beta}^x + \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|} \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} dy. \quad (23)$$

Как и раньше, производную  $\partial_x f$  в соотношении (23) выразим через производную по некоторому направлению. В качестве такого направления выберем  $\mu = \mu_{PE}$  на «восточной» границе  $\gamma_{sene}$  и  $\mu = \mu_{PW}$  на «западной» границе  $\gamma_{nwsw}$ . Для «восточной» границы  $\gamma_{sene}$  получим

$$\int_{\gamma_{sene}} \frac{\delta y_{sene}}{|\delta y_{sene}|} \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} dy = \int_{\gamma_{sene}} \frac{1}{\mu_{PE}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy + \int_{\gamma_{sene}} \left( -\frac{\mu_{PE}^y}{\mu_{PE}^x} \right) \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} dy. \quad (24)$$

Первое слагаемое в правой части равенства (24) аппроксимируем следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{\gamma_{sene}} \frac{1}{\mu_{PE}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy &= \int_{\gamma_{sene}} \frac{\Delta \gamma_{PE}}{\delta x_{PE}} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy \approx \frac{1}{2} [h_{ne}^y \varkappa_{ne} + h_{se}^y \varkappa_{se}] \frac{\Delta \gamma_{PE}}{\delta x_{PE}} f_{\mu_{PE}} = \\ &= 0.5 [h_{ne}^y \varkappa_{ne} + h_{se}^y \varkappa_{se}] (|\delta x_{PE}| / \delta x_{PE}) \sqrt{1 + (\delta y_{PE} / \delta x_{PE})^2} f_{\mu_{PE}}. \end{aligned}$$

Для аппроксимации второго слагаемого в правой части равенства (24) воспользуемся следующей квадратурной формулой:

$$\begin{aligned} \int_{\gamma_{sene}} \left( -\frac{\mu_{PE}^y}{\mu_{PE}^x} \right) \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} dy &\approx \frac{1}{2} \left[ h_{ne}^y \left( -\frac{\mu_{ne}^y}{\mu_{ne}^x} \right) \varkappa_{ne} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{ne} + h_{se}^y \left( -\frac{\mu_{se}^y}{\mu_{se}^x} \right) \varkappa_{se} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{se} \right] = \\ &= 0.5 [h_{ne}^y (-\delta y_{nne} / \delta x_{nne}) \varkappa_{ne} [\partial_y f]_{ne}^h + h_{se}^y (-\delta y_{sse} / \delta x_{sse}) \varkappa_{se} [\partial_y f]_{se}^h]. \end{aligned}$$

Поток  $\mathcal{I}_e$  через «восточную» границу ячейки можно представить в виде

$$\mathcal{I}_e = 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu\mu} + h_{se}^y M_{se}^{\mu\mu}] f_{P,\mu} + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu y} f_{e,y} + h_{se}^y M_{se}^{\mu y} f_{e,\bar{y}}],$$

где коэффициенты  $M^{\mu\mu}$ ,  $M^{\mu y}$  вычисляются по формулам

$$M_{ne}^{\mu\mu} = \varkappa_{ne} \sqrt{1 + (y_{P,x})^2}, \quad M_{se}^{\mu\mu} = \varkappa_{se} \sqrt{1 + (y_{P,x})^2}, \quad M_{ne}^{\mu y} = M_{ne}^{y\mu}, \quad M_{se}^{\mu y} = M_{se}^{y\mu}.$$

Интеграл  $\mathcal{I}_w$  вдоль «западной» границы  $\gamma_{nwsw}$  вычисляется аналогично.

Таким образом, аппроксимация диссипативных членов на подвижной сетке имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_P(f) dS_P = & 0.5 [h_e^x M_{ne}^{yy} + h_w^x M_{nw}^{yy}] f_{P,y} + \Delta \gamma_{ne} M_{ne}^{y\mu} f_{n,\mu} + \Delta \gamma_{nw} M_{nw}^{y\mu} f_{n,\bar{\mu}} - \\ & - (0.5 [h_e^x M_{se}^{yy} + h_w^x M_{sw}^{yy}] f_{P,\bar{y}} + \Delta \gamma_{se} M_{se}^{y\mu} f_{s,\mu} + \Delta \gamma_{sw} M_{sw}^{y\mu} f_{s,\bar{\mu}}) + \\ & + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu\mu} + h_{se}^y M_{se}^{\mu\mu}] f_{P,\mu} + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu y} f_{e,y} + h_{se}^y M_{se}^{\mu y} f_{e,\bar{y}}] - \\ & - (0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu\mu} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu\mu}] f_{P,\bar{\mu}} + 0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu y} f_{w,y} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu y} f_{w,\bar{y}}]). \end{aligned} \quad (25)$$

Можно показать, что разностный оператор, заданный формулой (25), является самосопряженным и отрицательно определенным относительно соответствующего сеточного скалярного произведения [12, 13].

В уравнении массопереноса на фронте кристаллизации в аппроксимации диссипативных членов (25) возникает дополнительное слагаемое. Из закона сохранения массы (13) получим, что скачок равен

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{P^*}(C) dS_{P^*} = & - \int_{\gamma_{wP}} (C_{ph}^{cr} - C_{ph}^{lq}) v^{ph} N_{wP}^y d\gamma - \int_{\gamma_{Pe}} (C_{ph}^{cr} - C_{ph}^{lq}) v^{ph} N_{Pe}^y d\gamma \approx \\ & \approx -\hbar^x (C_{P^*}^{cr} - C_{P^*}^{lq}) (\bar{v}^{ph})^y. \end{aligned}$$

Здесь

$$(\bar{v}^{ph})^y = \frac{0.5[v_P^{ph} + v_w^{ph}]h_w^x + 0.5[v_P^{ph} + v_e^{ph}]h_e^x}{2\hbar_P^x}.$$

Рассмотрим пространственную аппроксимацию **конвективных членов**

$$\mathcal{K}_P(f, \psi) dS_P = \int_{S_P(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x(f) + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y(f) \right] d\Omega.$$

Из формулы Остроградского – Гаусса для конвективных членов имеем

$$\int_{S_P(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x(f) + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y(f) \right] d\Omega = \sum_{\alpha, \beta \in V} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \mathcal{H}^x(f) N_{\alpha\beta}^x + \mathcal{H}^y(f) N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma. \quad (26)$$

Вычислим интегралы вдоль «горизонтальных» границ  $\gamma_{ne n}, \gamma_{nw}, \gamma_{sws}, \gamma_{sse}$ . С помощью соотношения (20) преобразуем контурные интегралы, входящие в правую часть равенства (26), следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ f \frac{\partial \psi}{\partial y} N_{\alpha\beta}^x - f \frac{\partial \psi}{\partial x} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \\ & = - \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} f \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma + \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^x + \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^y \right] f \frac{\partial \psi}{\partial y} d\gamma. \end{aligned} \quad (27)$$

Второе слагаемое в правой части соотношения (27) обращается в ноль в силу ортогональности  $N_{\alpha\beta}$  и  $\mu_{\alpha\beta}$ . При этом для первого слагаемого в (27) имеем

$$- \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} f \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma \approx \Delta \gamma_{\alpha\beta} \left[ f \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{\alpha\beta}} \right]^h.$$

Здесь  $[f \partial \psi / \partial \mu_{\alpha\beta}]^h$  – разностная аппроксимация  $f \partial \psi / \partial \mu_{\alpha\beta}$ , которая вычисляется на «горизонтальных» границах ячейки  $S_P(t)$  следующим образом. На границе  $\gamma_{ne n}$  положим

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{ne n}} \right]^h = C_n \psi_{\mu_{ne n}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{ne n}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta \gamma_{EP} \omega_P \psi_{\mu_{EP}} + \Delta \gamma_{NE n} \omega_N \psi_{\mu_{NE n}}]}{2 \Delta \gamma_{ne n}},$$

где  $\psi_{\mu_{NE n}} = (\psi_N - \psi_{NE}) / \Delta \gamma_{NE n}$ . На границе  $\gamma_{nw}$  будем вычислять соответству-

ющие производные как

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{n \text{nw}}} \right]^h = C_n \psi_{\mu_{n \text{nw}}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{n \text{nw}}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta \gamma_{PW} \omega_P \psi_{\mu_{PW}} + \Delta \gamma_{NNW} \omega_N \psi_{\mu_{NNW}}]}{2 \Delta \gamma_{n \text{nw}}},$$

где  $\psi_{\mu_{NNW}} = (\psi_{NW} - \psi_N) / \Delta \gamma_{NNW}$ . Аналогично на границе  $\gamma_{sw,s}$  зададим

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{sws}} \right]^h = C_s \psi_{\mu_{sws}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{sws}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta \gamma_{WP} \omega_P \psi_{\mu_{WP}} + \Delta \gamma_{SWS} \omega_S \psi_{\mu_{SWS}}]}{2 \Delta \gamma_{sws}},$$

на границе  $\gamma_{sse}$  воспользуемся формулами

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{sse}} \right]^h = C_s \psi_{\mu_{sse}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{sse}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta \gamma_{PE} \omega_P \psi_{\mu_{PE}} + \Delta \gamma_{SSE} \omega_S \psi_{\mu_{SSE}}]}{2 \Delta \gamma_{sse}}.$$

Здесь  $\psi_{\mu_{sws}} = (\psi_s - \psi_{sw}) / \Delta \gamma_{sws}$ ,  $\psi_{\mu_{sse}} = (\psi_{se} - \psi_s) / \Delta \gamma_{sse}$ .

Вычислим контурные интегралы, входящие в правую часть соотношения (27), вдоль «вертикальных» границ  $\gamma_{nwsw}$  и  $\gamma_{sene}$ . Воспользуемся тем, что на «вертикальных» границах  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta} / |\delta y_{\alpha\beta}|$  и  $N_{\alpha\beta}^y = 0$ , откуда

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ f \frac{\partial \psi}{\partial y} N_{\alpha\beta}^x - f \frac{\partial \psi}{\partial x} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|} d\gamma \approx \Delta \gamma_{\alpha\beta} \left[ f \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]^h \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|}.$$

Разностные аппроксимации операторов  $f \partial \psi / \partial y$  будем вычислять следующим образом. На границе  $\gamma_{sene}$  зададим

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_e^h = C_e \psi_{e,\dot{y}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_e^h = \frac{0.5 [\hbar_P^y \omega_P \psi_{P,\dot{y}} + \hbar_E^y \omega_E \psi_{E,\dot{y}}]}{\hbar_e^y},$$

на противоположащей границе  $\gamma_{nwsw}$  воспользуемся формулами

$$\left[ C \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_w^h = C_w \psi_{w,\dot{y}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_w^h = \frac{0.5 [\hbar_P^y \omega_P \psi_{P,\dot{y}} + \hbar_W^y \omega_E \psi_{E,\dot{y}}]}{\hbar_w^y}.$$

При этом  $\delta y_{sene} / |\delta y_{sene}| = 1$ ,  $\delta y_{nwsw} / |\delta y_{nwsw}| = -1$ .

Таким образом, аппроксимация конвективных членов в уравнении массопе-



реноса имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_P(C, \psi)dS_P &= C_e \psi_{e,y} \overset{\circ}{h}_e^y - C_w \psi_{w,y} \overset{\circ}{h}_w^y - \\ &- (C_n[\psi_{n,\mu} \Delta\gamma_{nen} + \psi_{n,\bar{\mu}} \Delta\gamma_{n\bar{n}w}] - C_s[\psi_{s,\mu} \Delta\gamma_{sse} + \psi_{s,\bar{\mu}} \Delta\gamma_{sws}]). \end{aligned} \quad (28)$$

Для уравнения переноса завихренности получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_P(\omega, \psi)dS_P &= \omega_E \psi_{E,y} \frac{\overset{\circ}{h}_E^y}{2} - \omega_W \psi_{W,y} \frac{\overset{\circ}{h}_W^y}{2} - \\ &- \left( \omega_N \left[ \psi_{N,\mu} \frac{\Delta\gamma_{NEN}}{2} + \psi_{N,\bar{\mu}} \frac{\Delta\gamma_{N\bar{N}W}}{2} \right] - \omega_S \left[ \psi_{S,\mu} \frac{\Delta\gamma_{SSE}}{2} + \psi_{S,\bar{\mu}} \frac{\Delta\gamma_{SWS}}{2} \right] \right). \end{aligned} \quad (29)$$

Конвективные члены, записанные в форме (28), (29), не вносят вклад в балансы массы и кинетической энергии [12, 13].

Для построения аппроксимации **производной по времени** воспользуемся транспортной теоремой Рейнольдса

$$\frac{d}{dt} \int_{S_P(t)} f dx dy = \int_{S_P(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy + \int_{\partial S_P(t)} (fv \cdot N) d\gamma. \quad (30)$$

Здесь  $v$  — скорость движения границы ячейки  $S_P(t)$ . Проинтегрировав соотношение (30) по отрезку  $[t_k, t_{k+1}]$ , получим

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_P(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d}{dt} \int_{S_P(t)} f dx dy dt - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\partial S_P(t)} (fv \cdot N) d\gamma dt. \quad (31)$$

Рассмотрим слагаемые, стоящие в правой части равенства (31). Первое слагаемое аппроксимируем следующим образом:

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d}{dt} \int_{S_P(t)} f dx dy dt = \widehat{f}_P \sum_{q=1}^4 \widehat{dS}_q - f_P \sum_q dS_q. \quad (32)$$

Площади ячеек  $dS_q$ ,  $\widehat{dS}_q$  будем вычислять как площади соответствующих трапеций, используя значения координат вершин этих ячеек на слое  $t_k$  и  $t_{k+1}$ , со-

ответственно. Для  $dS_q$ ,  $q = \overline{1, 4}$  имеем

$$dS_1 = \frac{[h_n^y + h_{ne}^y]h_e^x}{8}, \quad dS_2 = \frac{[h_n^y + h_{nw}^y]h_w^x}{8}, \quad dS_3 = \frac{[h_s^y + h_{sw}^y]h_w^x}{8}, \quad dS_4 = \frac{[h_s^y + h_{se}^y]h_e^x}{8}.$$

Расчетная ячейка  $S_P(t)$  перемещается только в направлении оси  $y$ , т.е.  $v = (0, v^y)$ . Поэтому для второго слагаемого в правой части равенства (31) справедливо соотношение

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\partial S_P(t)} (fv \cdot N) d\gamma dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \sum_{\alpha, \beta \in V} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f v^y N_{\alpha\beta}^y d\gamma dt. \quad (33)$$

Для интегралов вдоль «горизонтальных» границ получаем

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f v^y N_{\alpha\beta}^y d\gamma dt \approx \tau \left( \Delta \gamma_{\alpha\beta} [f]^h \frac{v_\alpha^y + v_\beta^y}{2} N_{\alpha\beta}^y \right) \Big|_{t=t_k}^{t=t_{k+1}} = \tau \left( -\delta x_{\alpha\beta} [\hat{f}]^h \frac{v_\alpha^y + v_\beta^y}{2} \right). \quad (34)$$

Здесь  $[\hat{f}]^h = \hat{f}_n$  для «северных» границ  $\gamma_{ne}$ ,  $\gamma_{nw}$  и  $[\hat{f}]^h = \hat{f}_s$  для «южных» границ  $\gamma_{sw}$ ,  $\gamma_{se}$ . Скорости движения  $v_\alpha^y$ ,  $\alpha \in V$  вершин контрольного объема равны средним значениям, вычисленным по соответствующим значениям скоростей узлов сетки, например,  $v_n^y = 0.5[v_P^y + v_N^y]$ ,  $v_{ne} = 0.25[v_P^y + v_N^y + v_E^y + v_{NE}^y]$  и т.д.

Таким образом, аппроксимация производной по времени в регулярной точке подвижной сетки  $\omega(t)$  имеет вид

$$\mathcal{T}_P(f) dS_P = (f_P dS_P)_t - \left( \bar{v}_n^y \hat{f}_n - \bar{v}_s^y \hat{f}_s \right) \bar{h}_P^x, \quad (35)$$

где скорость  $\bar{v}^y$  вычисляется как

$$\bar{v}_n^y = \frac{0.5[v_n^y + v_{ne}^y]h_e^x + 0.5[v_n^y + v_{nw}^y]h_w^x}{2\bar{h}_P^x}, \quad \bar{v}_s^y = \frac{0.5[v_s^y + v_{se}^y]h_e^x + 0.5[v_s^y + v_{sw}^y]h_w^x}{2\bar{h}_P^x}.$$

В уравнении массопереноса для аппроксимации производной по времени на

фронте кристаллизации используется выражение

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{P^*}(C) dS_{P^*} &= (C_{P^*}^{\text{liq}} [dS_1 + dS_2])_t + (C_{P^*}^{\text{cr}} [dS_3 + dS_4])_t - \\ &- (\bar{v}_n^y \widehat{C}_n - \bar{v}_s^y \widehat{C}_s) \hbar_{P^*}^x - \hbar_{P^*}^x (C_{P^*}^{\text{cr}} - C_{P^*}^{\text{liq}}) (\bar{v}^{\text{ph}})^y. \end{aligned} \quad (36)$$

В работе [12] показано, что недивергентная форма записи аппроксимации производной по времени в уравнении переноса завихренности и в уравнении массопереноса определяется выражением

$$\mathcal{T}_P(f) dS_P = \omega_{P,t} dS_P - 0.5 [\widehat{h}_n^y \bar{v}_n^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}} + \widehat{h}_s^y \bar{v}_s^y \widehat{f}_{P,\bar{y}}] \hbar_P^x. \quad (37)$$

Для аппроксимации **объемной силы** в уравнении переноса завихренности (1) используется следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_P(C) dS_P^{(x,y)} &= \text{Gr} (C_e \hbar_e^y - C_w \hbar_w^y) + \\ &+ \text{Gr} (C_n [(-y_{n,x}) \hbar_e^x + (-y_{n,\bar{x}}) \hbar_w^x] - C_s [(-y_{s,x}) \hbar_e^x + (-y_{s,\bar{x}}) \hbar_w^x]). \end{aligned} \quad (38)$$

### 3.3 Разностная схема

Во внутренних точках жидкой фазы разностная схема для уравнения Навье — Стокса имеет вид

$$\mathcal{T}_P(\omega) dS_P + \mathcal{K}_P(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) dS_P = \mathcal{D}_P(\widehat{\omega}) dS_P - \mathcal{F}_{P^*}(C^{\text{liq(A)}}) dS_P - \mathcal{F}_{P^*}(C^{\text{liq(B)}}) dS_P, \quad (39)$$

$$-\widehat{\omega} dS_P = \mathcal{D}_P(\widehat{\psi}) dS_P. \quad (40)$$

Для уравнения массопереноса во внутренних точках жидкой фазы и на фронте кристаллизации получим следующую разностную схему:

$$\mathcal{T}_P(C^{\text{liq}(m)}) dS_P + \mathcal{K}_P(\widehat{C}^{\text{liq}(m)}, \psi) dS_P = \left[ \mathcal{D}_P(\widehat{C}^{\text{liq}(m)}) + \mathcal{E}_{P^*}(\widehat{C}^{\text{liq}(m)}) \delta_{PP^*} \right] dS_P. \quad (41)$$

Во внутренних точках твердой фазы имеем

$$\mathcal{T}_P(C^{\text{cr(A)}}) dS_P = \mathcal{D}_P(\widehat{C}^{\text{cr(A)}}) dS_P, \quad (42)$$

$$(a_A + a_C)\widehat{C}_P^{\text{cr}(A)} + (a_B + a_C)\widehat{C}_P^{\text{cr}(B)} = \rho^{\text{cr}}. \quad (43)$$

В работе [12] показано, что схема (39)–(42) алгебраически эквивалентна разностной схеме, полученной с помощью метода выпрямления фронта на фиксированной сетке. Соответствующая разностная схема является консервативной, для нее справедливы дискретные аналоги законов сохранения завихренности, кинетической энергии, балансы массы для компонентов [13].

Для упрощения вычислительной процедуры коэффициенты  $M^{\mu\mu}$ ,  $M^{\mu y}$ ,  $M^{yy}$  и скорость  $\bar{v}^y$  в разностной схеме (39)–(42) взяты с нижнего временного слоя. Для решения соответствующей системы нелинейных уравнений применяется метод расщепления по физическим процессам [14]. Сначала из разностных аналогов уравнений Навье–Стокса определяется поле скоростей жидкости: система уравнений (39), (40) решается совместно, относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются функция тока и завихренность. Затем из уравнений (41)–(43), дополненных фазовой диаграммой системы, вычисляется состав твердой и жидкой фаз, скорость фронта кристаллизации.

## 4 Результаты расчетов

Рассмотрим рост трехкомпонентного соединения в условиях принудительного охлаждения. Пусть насыщенный при температуре  $T_{\text{sat}} = 783$  К раствор компонентов **A** и **B** в веществе **C** приводится в контакт с подложкой  $A_{0.207}B_{0.793}C$ . Температуру в области понижают по закону  $T(t) = T_{\text{sat}} - \eta t$ ,  $\eta = 0.5$  К/мин. В результате охлаждения жидкая фаза становится пересыщенной вблизи границы раздела, происходит рост кристалла переменного состава. Плотность раствора падает с уменьшением концентрации компонентов **A** и **B**. В ходе кристаллизации раствор в окрестности межфазной границы обедняется, и в жидкой фазе образуется неустойчивый градиент плотности, способствующий возникновению конвективного движения.

Фазовая диаграмма соединения заимствована из работы [15] и имеет вид

$$x^{\text{cr(AC)}} = 4\gamma_A x^{\text{lq(A)}} x^{\text{lq(C)}} \exp\left(\frac{\Delta H_{\text{AC}}^{\text{melt}}}{R T_{\text{AC}}^{\text{melt}}} \frac{T_{\text{AC}}^{\text{melt}} - T}{T}\right), \quad (44)$$

$$x^{\text{cr(BC)}} = 4\gamma_B x^{\text{lq(B)}} x^{\text{lq(C)}} \exp\left(\frac{\Delta H_{\text{BC}}^{\text{melt}}}{R T_{\text{BC}}^{\text{melt}}} \frac{T_{\text{BC}}^{\text{melt}} - T}{T}\right), \quad (45)$$

$$x^{\text{lq(A)}} + \kappa x^{\text{lq(B)}} = \frac{v}{1 - x^{\text{lq(A)}} - x^{\text{lq(B)}}}. \quad (46)$$

Здесь  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\Delta H_m^{\text{melt}}$  — удельная энтальпия плавления,  $T_m^{\text{melt}}$  — температура плавления,  $m = \text{AC}, \text{BC}$ ,  $\kappa = (\gamma_B \Theta_{\text{BC}})/(\gamma_A \Theta_{\text{AC}})$ ,  $v = 1/(4\gamma_A \Theta_{\text{AC}})$ , где

$$\Theta_{\text{AC}} = \exp\left(\frac{\Delta H_{\text{AC}}^{\text{melt}}}{R T_{\text{AC}}^{\text{melt}}} \frac{T_{\text{AC}}^{\text{melt}} - T}{T}\right), \quad \Theta_{\text{BC}} = \exp\left(\frac{\Delta H_{\text{BC}}^{\text{melt}}}{R T_{\text{BC}}^{\text{melt}}} \frac{T_{\text{BC}}^{\text{melt}} - T}{T}\right).$$

Безразмерные параметры твердой и жидкой фаз:  $D^{\text{cr(m)}} = 10^{-7}$ ,  $Sc^{\text{m}} = 56.8$ ,  $Gr^{\text{A}} \approx 4000$ ,  $Gr^{\text{B}} \approx 20000$  при  $H_2 = 0.1$  см и  $\Delta C^{\text{d}} = 0.01$  [моль/см<sup>3</sup>].

Длина ростовой камеры  $H_1 = 1$  см, толщина подложки — 300 мкм. Численно изучим влияние высоты слоя жидкости на ход процесса кристаллизации. Во всех расчетах в начальный момент времени подвижная сетка в твердой и жидкой фазах является прямоугольной и равномерной по каждому из координатных направлений.

Пусть толщина раствора  $H_2 = 0.1$  см. Сетка по пространству имеет следующие параметры: число узлов по ширине ростовой камеры  $M = 100$ , число узлов по высоте кристалла  $j^* = 100$ , по высоте раствора —  $N - j^* = 10$ . Шаг по времени  $\tau = 2.25t_{\nu,1}$ , где  $t_{\nu,1} = H_2^2/\nu \approx 3.5$  сек. Расчеты показывают, что в данном случае величина концентрационного градиента, возникающего в жидкой фазе в ходе процесса, является недостаточной для развития конвективного движения. Рост происходит в диффузионном режиме, и фронт кристаллизации является плоским. Составы твердой и жидкой фаз при  $t = 2250t_{\nu,1}$  приведены на рисунке 3. В соответствии с фазовой диаграммой системы при понижении температуры концентрация компонентов в твердой и жидкой фазе на фронте кристаллизации уменьшается.

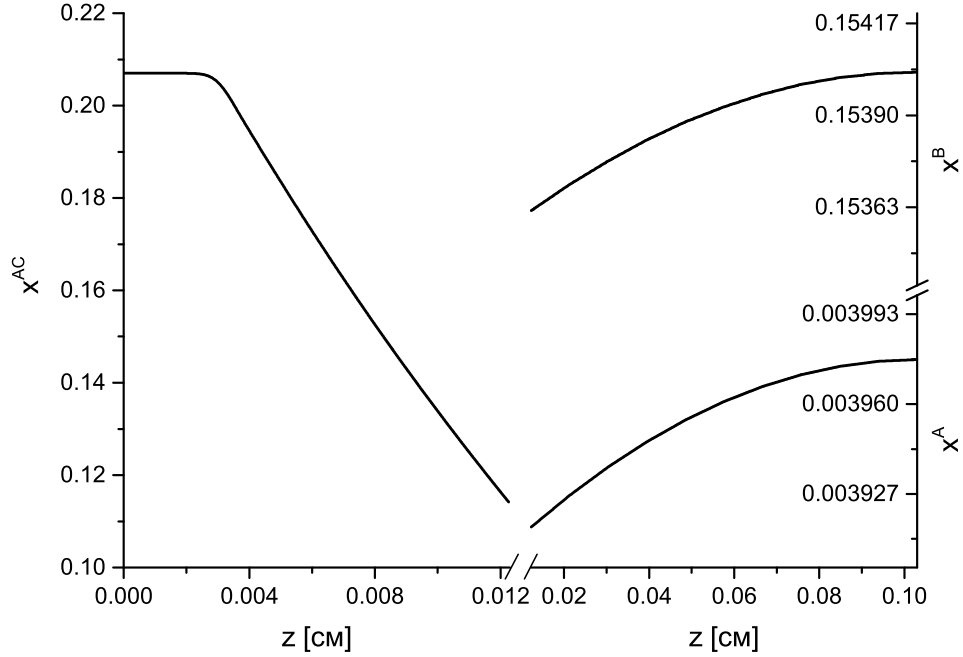


Рис. 3: Распределения концентрации в твердой и жидкой фазах при  $H_2 = 0.1$  см в момент  $t = 2250t_{\nu,1}$ .

При увеличении высоты раствора ( $H_2 = 0.15$ ) см в жидкой фазе возникает конвективное движение. Результаты расчетов, полученные на подвижной сетке ( $M = 100$ ,  $j^* = 100$ ,  $N - j^* = 15$ ,  $\tau = 1t_{\nu,2}$ , где  $t_{\nu,2} = H_2^2/\nu \approx 8$  сек), показывают, что на начальном этапе процесса в растворе образуется 8 конвективных валов (Рис. 4). В окрестности фронта кристаллизации зоны, в которых концентрационный градиент велик, чередуются с областями, в которых величина потока вещества через границу минимальна. Поэтому в соответствии с законом сохранения массы (13) происходит рост кристалла, поверхность которого имеет регулярную периодическую форму. Однако на развитой стадии процесса из-за обеднения раствора и уменьшения толщины жидкой фазы течение перестраивается — количество конвективных валов уменьшается (Рис. 5). Зоны с максимальными и минимальными концентрационными градиентами смещаются вправо вдоль оси  $Ox$ , это отражается на форме поверхности кристалла.

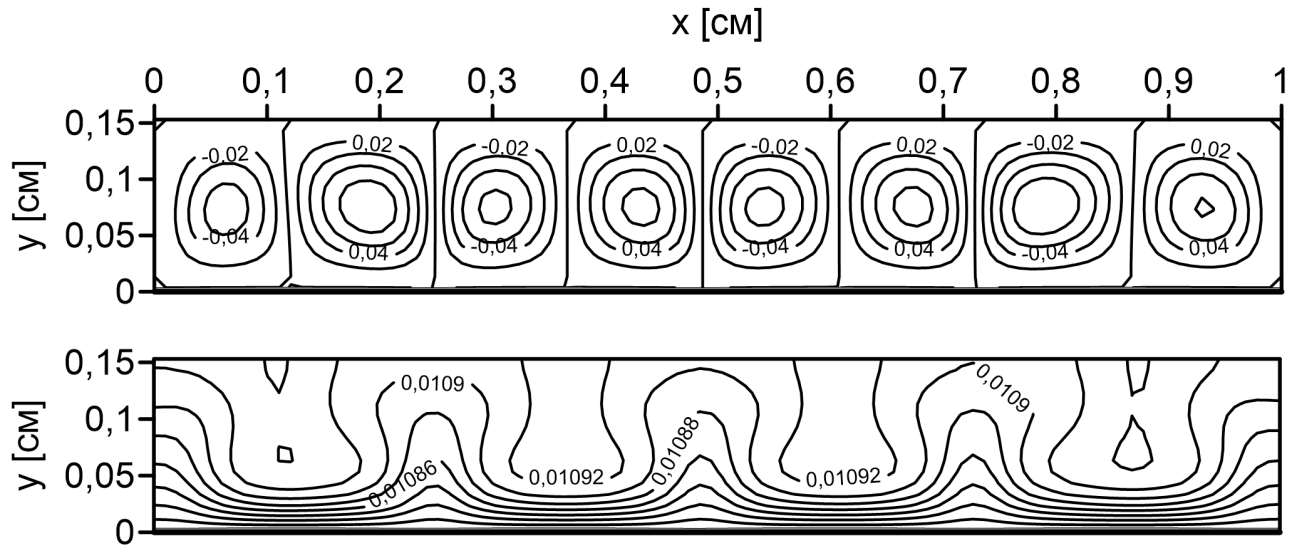


Рис. 4: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента А в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.15$  см в момент  $t = 100t_{\nu,2}$ .

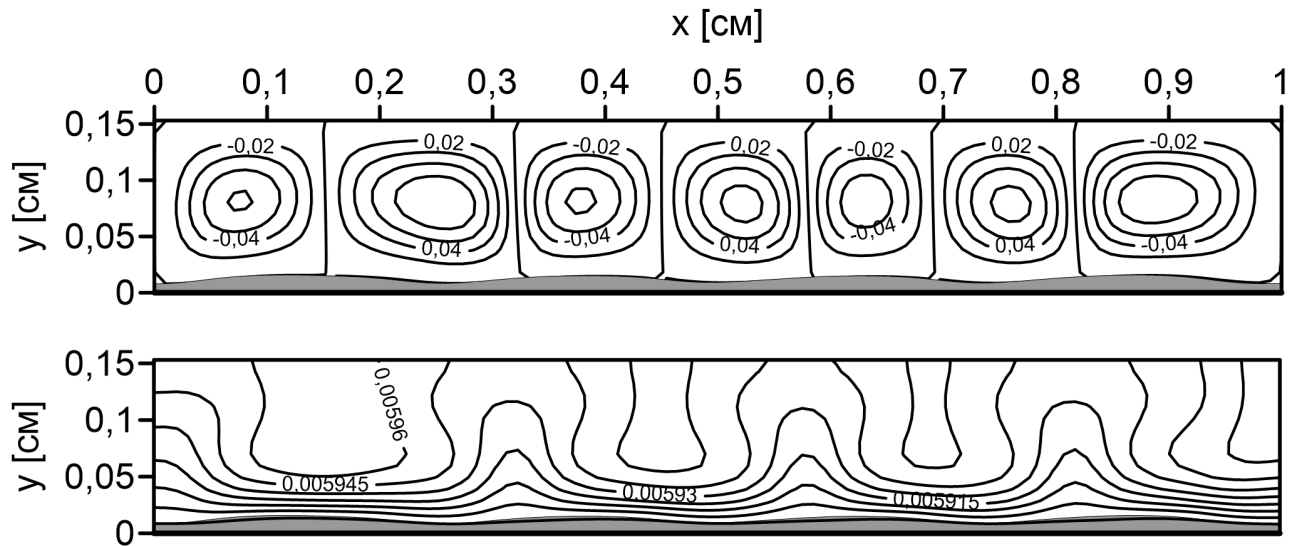


Рис. 5: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента А в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.15$  см в момент  $t = 700t_{\nu,2}$ .

В случае  $H_2 = 0.2$  см расчеты проводились на сетке со следующими параметрами:  $M = 100$ ,  $j^* = 100$ ,  $N - j^* = 20$ ,  $\tau = 0.55t_{\nu,3}$ , где  $t_{\nu,3} = H_2^2/\nu \approx 14$  сек. Численное моделирование показывает, что при увеличении высоты ростовой камеры растет интенсивность конвективного массопереноса, изменяется структура течения — на ранней стадии процесса в растворе образуются 7 конвективных валов (рис. 6).

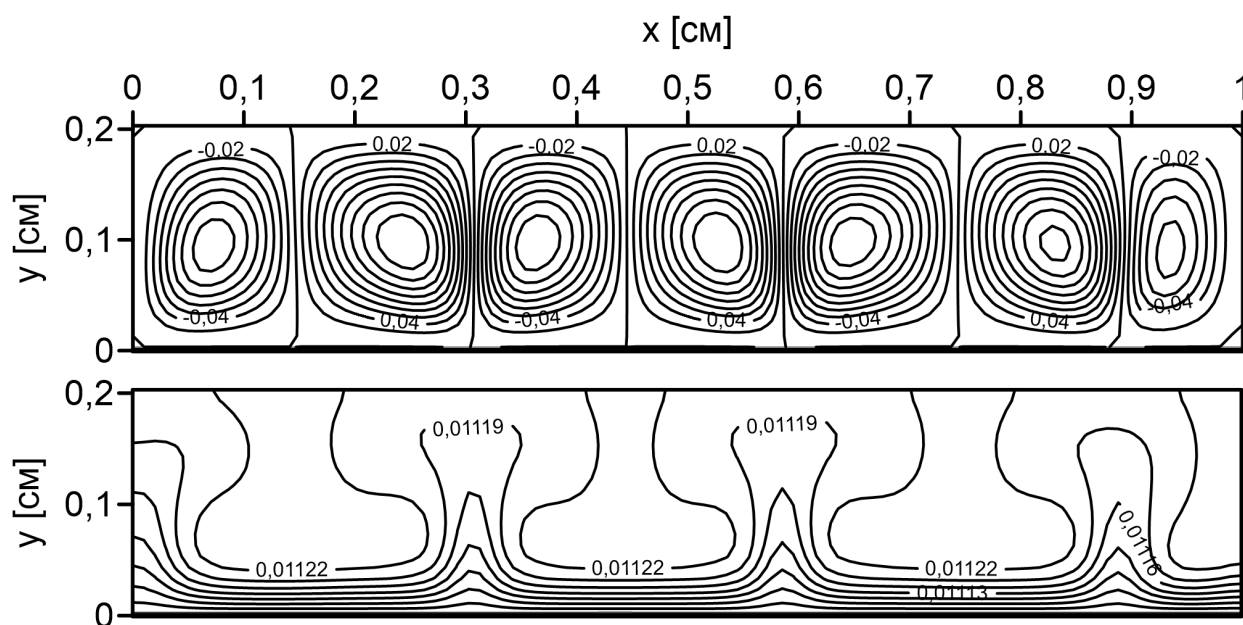


Рис. 6: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента А в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.2$  см в момент  $t = 40t_{\nu,3}$ .

Через некоторое время течение перестраивается, и образуется система из четырех валов, движущихся вдоль фронта кристаллизации влево (рис. 7). Зоны с минимальным по величине потоком компонентов располагаются в центральной части раствора и у боковых стенок ростовой камеры.

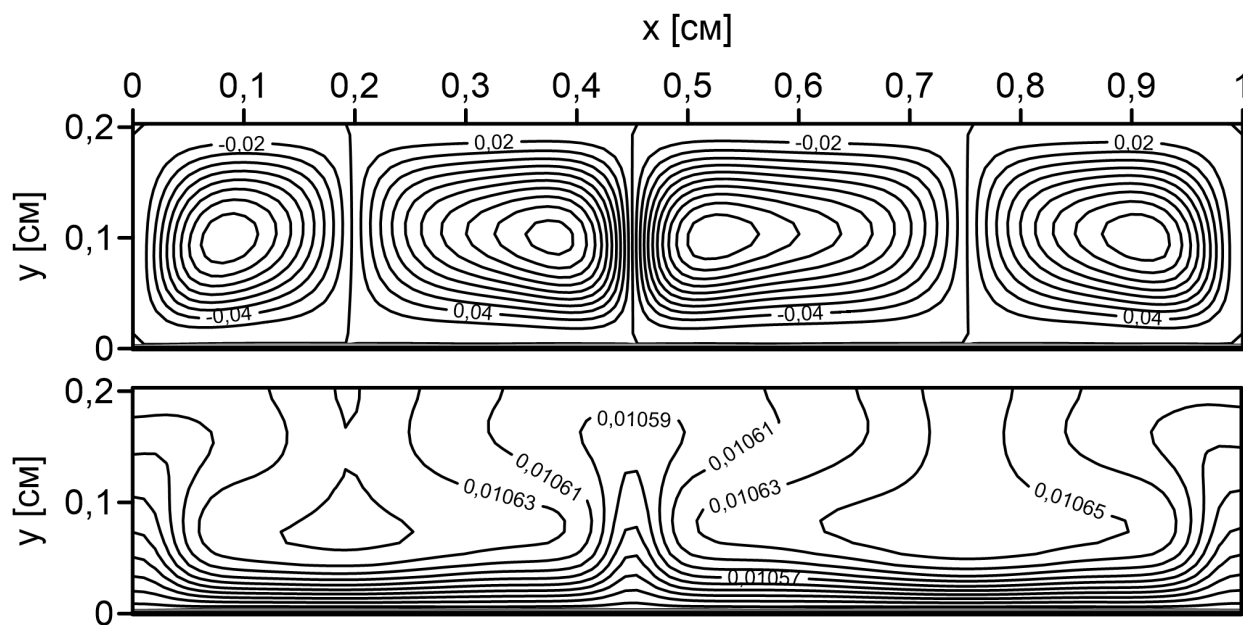


Рис. 7: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента А в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.2$  см в момент  $t = 80t_{\nu,3}$ .



Пусть  $H_2=0.25$  см,  $M = 100$ ,  $j^* = 100$ ,  $N - j^* = 25$ ,  $\tau = 0.35t_{\nu,4}$ , где  $t_{\nu,4} = H_2^2/\nu \approx 22$  сек. В этом случае в жидкой фазе наблюдается интенсивное конвективное движение. Из рисунков 8 и 9 видно, что в ходе процесса структура течения изменяется. Особенностью конвективного движения при  $H_2=0.25$  см является наличие, наряду с крупными валами, валов более мелкого масштаба, движущихся вдоль фронта кристаллизации от границ области к ее центру и изменяющих структуру течения вблизи фронта кристаллизации. Минимальные по величине концентрационные градиенты располагаются у стенок камеры (рис. 9). Поэтому основные неоднородности в форме поверхности кристалла сосредоточены у вертикальных границ области

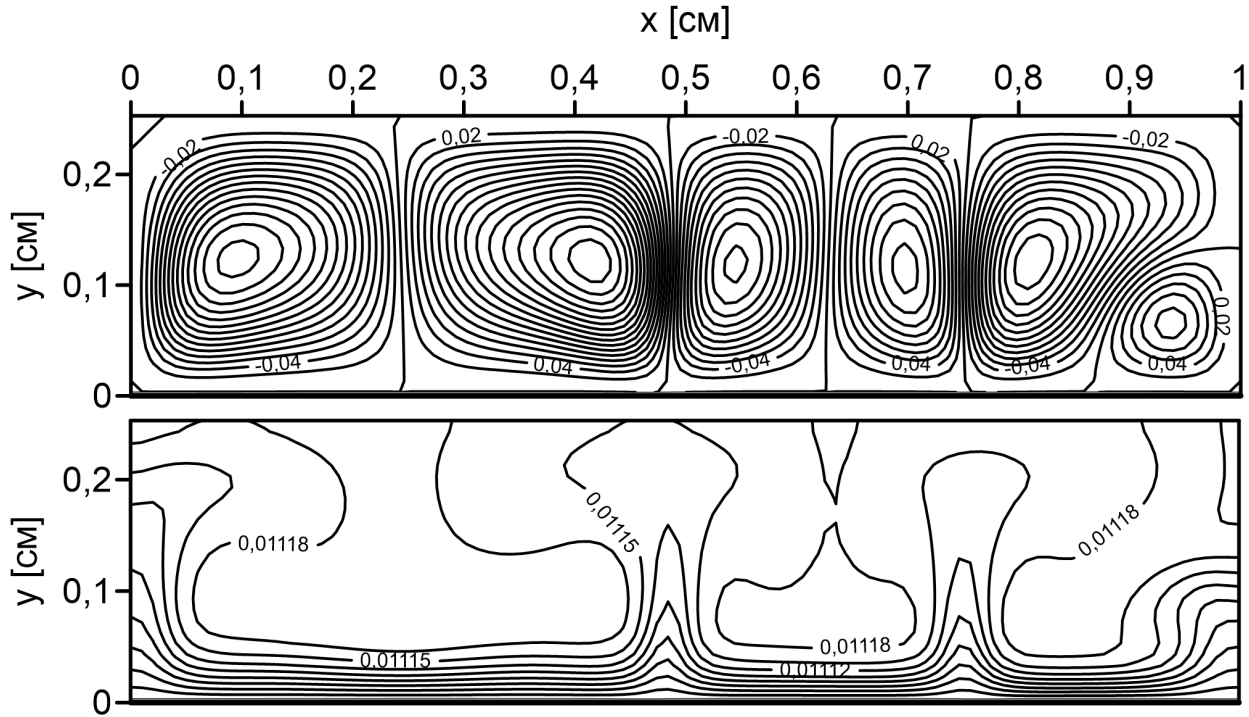


Рис. 8: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента А в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.25$  см в момент  $t = 30t_{\nu,4}$ .

При  $H_2=0.3$  см сохраняется структура течения, близкая к наблюдаемой при  $H_2=0.25$  см. Дальнейшее увеличение высоты жидкой фазы приводит к тому, что в растворе образуются нестационарные течения высокой интенсивности, быстро изменяющиеся во времени.

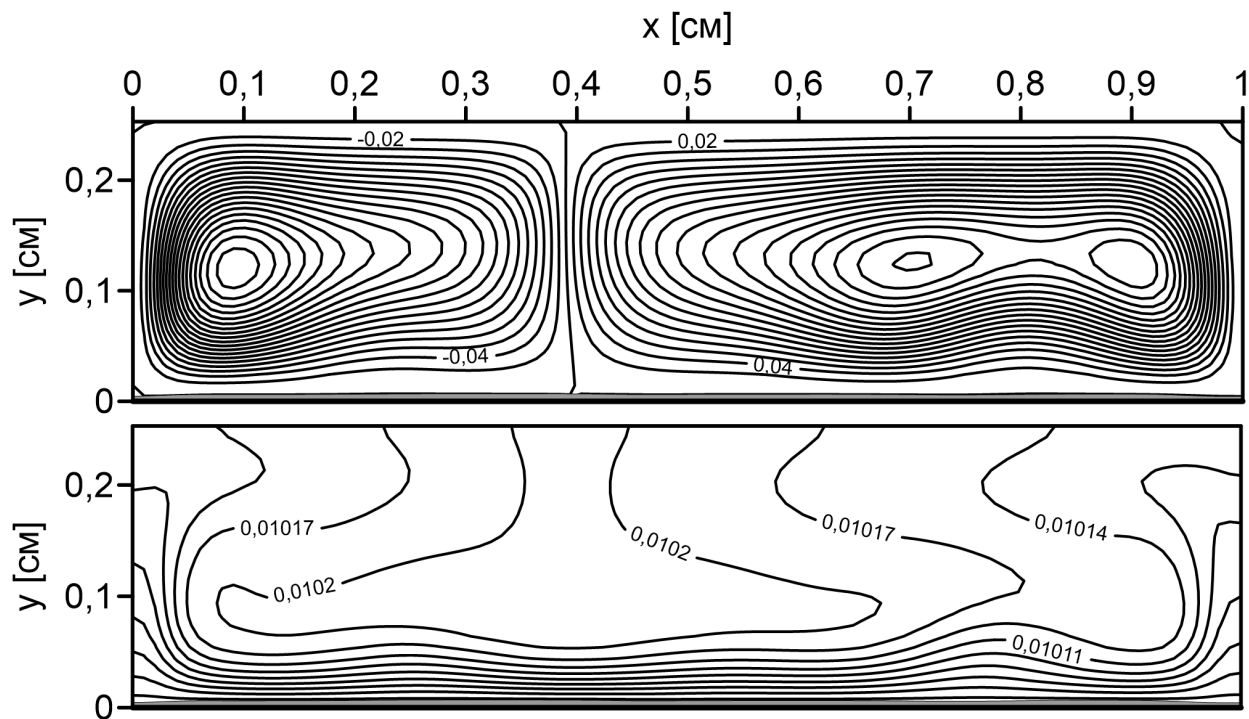


Рис. 9: Распределение функции тока (сверху) и содержание компонента  $A$  в растворе (снизу) при  $H_2 = 0.25$  см в момент  $t = 70t_{\nu,4}$ .

На рисунке (10) приведены распределения концентрации компонента  $A$  в твердой фазе, полученные в ходе численных экспериментов в ростовых камерах различной высоты. Расчеты показывают, что высота жидкой фазы определяет структуру течения, возникающего в растворе, и существенным образом влияет на состав и форму кристалла. Из рисунка (10) видно, что распределение компонентов по высоте твердой фазы близко к линейному. При этом увеличение высоты ростовой камеры, в соответствии с законом сохранения массы, приводит к уменьшению градиента концентрации в кристалле.

В рамках численных экспериментов на каждом шаге по времени осуществлялся контроль выполнения сеточных аналогов законов сохранения. Расчеты показали, что балансные соотношения для искомым величин выполняются с высокой точностью.

Длительные режимы выращивания, в ходе которых происходит рост порядка 1000 мкм твердой фазы, рассмотрены в работе для демонстрации возможностей вычислительного алгоритма. В реальности толщина эпитаксиальных слоев, как правило, не превосходит нескольких десятков мкм. При этом результаты чис-

ленного моделирования начальной стадии процесса согласуются с результатами, полученными в работе [2], в рамках модели, не учитывающей движение межфазной границы.

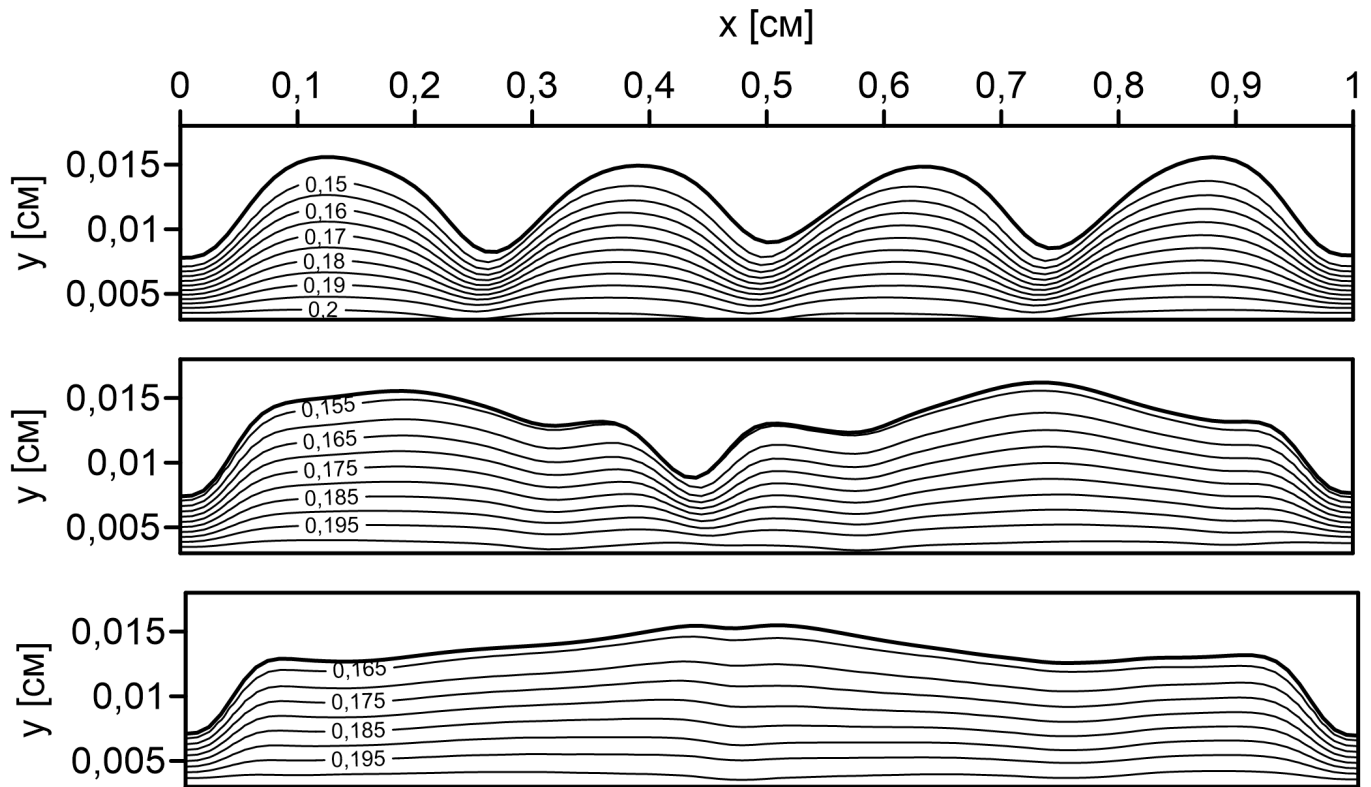


Рис. 10: Содержание компонента **A** в кристаллах, выращенных из жидкой фазы высоты  $H_2 = 0.15$  см (верхний рисунок),  $H_2 = 0.2$  см (средний рисунок),  $H_2 = 0.25$  см (нижний рисунок).

## 5 Заключение

Численные методы решения задач о фазовом переходе, основанные на использовании пространственных сеток, согласованных с формой границы раздела, позволяют определять положение фронта кристаллизации с высокой точностью. В работе [12] для классической двухфазной задачи Стефана в прямоугольной области на подвижной сетке построена консервативная разностная схема. В данной работе соответствующий подход применялся для решения задачи о кристаллизации трехкомпонентного раствора. Рассмотрена консервативная разностная схема для уравнений массопереноса. Построена аппроксимация

уравнений Навье-Стокса на подвижной сетке, обеспечивающая выполнение дискретного аналога закона сохранения кинетической энергии.

Возможности предложенного вычислительного алгоритма продемонстрированы на примере задачи о кристаллизации трехкомпонентного раствора в условиях принудительного охлаждения. Численно изучено влияние размеров ростовой камеры на характеристики твердой фазы. Показано, что в случае  $H_2 \leq 1$  мм рост кристалла происходит в диффузионном режиме, граница раздела является плоской. При этом в силу того, что объем жидкой фазы мал, происходит быстрое обеднение раствора, и выросший материал имеет неоднородный по высоте состав. Для уменьшения градиента концентрации в твердой фазе необходимо увеличивать высоту ростовой камеры. Однако расчеты показывают, что при  $H_2 > 1$  мм в растворе наблюдается естественная конвекция. Интенсивный перенос компонентов в жидкой фазе приводит к тому, что фронт кристаллизации искривляется и распределение состава по ширине кристалла становится неоднородным.

## Список литературы

1. Dost S., Lent B. Single crystal growth of semiconductors from metallic solutions. Elsevier, 2007. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-52232-0.X5000-7>.
2. Denisov I.A., Lakeenkov V.M., Mazhorova O.S., Popov Yu.P. Numerical modelling for liquid phase epitaxy of  $Cd_xHg_{1-x}Te$  solid solution // Journal of Crystal Growth. 2002. Vol. 245. Pp. 21– 30. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)01687-1](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01687-1).
3. Denisov I.A., Mazhorova O.S., Popov Yu.P., Smirnova N.A. Numerical modelling for convection in growth/dissolution of solid solution  $Cd_xHg_{1-x}Te$  by liquid phase epitaxy // Journal of Crystal Growth. 2004. Vol. 269. Pp. 284– 291. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.05.085> .

4. Qin Z., Kimura M., Dost S. Convection model for growth and dissolution of ternary alloys by liquid phase epitaxy // Journal of Crystal Growth. 1996. Vol. 167. Pp. 74 – 86. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(96\)00175-3](https://doi.org/10.1016/0022-0248(96)00175-3).
5. Dost S., Liu Y., Lent B. A numerical simulation study for the effect of applied magnetic field in liquid phase electroepitaxy // Journal of Crystal Growth. 2002. Vol. 240. Pp. 39– 51. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)00830-8](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)00830-8).
6. Kolmychkov V., Mazhorova O., Popov Yu. 3D computer simulation for convection in liquid phase epitaxy of ternary alloys // J. Crystal Growth. 2007. Vol. 303. Pp. 284–285. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2006.11.148>.
7. Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В. Консервативные разностные схемы для термо-диффузионной задачи Стефана. // Дифференциальные уравнения. 2013. Т. 49, № 7. С. 897 – 905.
8. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. 2020. Vol. 202. Pp. 104501. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104501> .
9. Patankar S. Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere publishing corporation, 1981.
10. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
11. Ferziger J., Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002.
12. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференциальные уравнения. 2021. Т. 57, № 7. С. 907–921. <https://doi.org/10.31857/S0374064121070050>.
13. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. О свойствах одного разностного метода решения двухфазной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. 2022. Т. 58, № 7. С. 930–946.

14. Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1981. 304 с.
15. Денисов И.А., Лакеенков В.М., Мажорова О.С., Попов Ю.П. Математическое моделирование эпитаксиального выращивания твёрдых растворов  $Cd_{\gamma}Hg_{1-\gamma}Te$  из жидкой фазы. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 1992. № 65. 42 стр.

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Постановка задачи</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Вычислительный алгоритм</b>	<b>7</b>
3.1	Сетка и сеточные функции . . . . .	8
3.2	Построение разностной схемы . . . . .	10
3.3	Разностная схема . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Результаты расчетов</b>	<b>19</b>
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>26</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>27</b>