

რესპუბლიკის ახალგაზრდა მეცნიერთა,
სპეციალისტთა და წარმოების მუშაკთა
კონფერენციის „მეცნიერება-პრაქტიკას“
მოხსენებათა

თ ე ზ ი ს ე ბ ი
ტ ე ჯ ი ს ე

ДОКЛАДОВ РЕСПУБЛИКАНСКОЙ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ, СПЕЦИАЛИСТОВ
И РАБОТНИКОВ ПРОИЗВОДСТВА
ПОД ДЕВИЗОМ «НАУКА — ПРАКТИКЕ»



თბილისი — 1984

ТБИЛИСИ—1984

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИЗ РАСПЛАВОВ

М.Г.БЕРЕЖИАН

ул.Ленина 77, ГПИ им.В.И.Ленина

Формирование кристаллического материала с заданной структурой возможно осуществить путем подбора режима кристаллизации. Для определения оптимального режима проведено математическое моделирование процесса кристаллизации из расплава на базе геометрико-вероятностной модели Колмогорова, основное кинетическое уравнение которой имеет вид [1,2]:

$$M(t) = 1 - \exp \left\{ - \int_0^t \alpha(\tau) C \left[\int_0^{\tau} v(\xi) d\xi \right]^n d\tau \right\} \quad (1)$$

где $M(t)$ - степень кристаллизации в момент времени t , α - интенсивность зародышеобразования, v - скорость линейного роста кристаллов, $n = 1, 2, 3$ - размерность реакционного пространства, C - коэффициент формы.

Вместо интеграла свертки (1) в качестве математической модели объемной кристаллизации предложена система дифференциальных уравнений:

$$\frac{dM}{dt} = 3 \frac{C_v}{C_F} F v(t) (1-M) \quad (1) \quad \frac{dR}{dt} = N v(t) \quad (3)$$

$$\frac{dF}{dt} = 2 C_F R v(t) \quad (2) \quad \frac{dN}{dt} = \alpha(t) \quad (4)$$

где F, R, N - соответственно суммарные поверхность, размер и число кристаллов в условиях неограниченного роста.

Легко составляется подобная система для кинетики процессов плоской или одномерной кристаллизации.

Результаты эксперимента, представленные на рис.1 указывают на адекватность математической модели. Подтверждается линейная зависимость для изотермической кристаллизации:

$$\ln[-\ln(1-M)] = A - n \ln t \quad (5)$$

Степень кристаллизации определяли методом измерения или блокировки светового потока и с помощью измерения электрических свойств расплава.

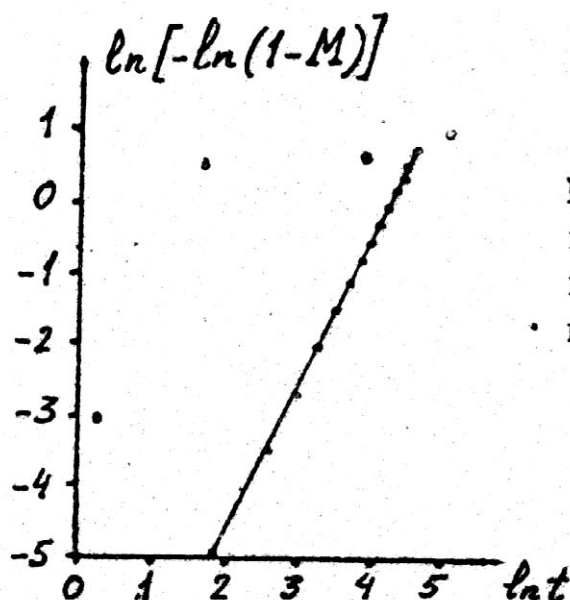


Рис.1. Кинетика изотермической кристаллизации $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ в тонкой пленке. Коэффициент наклона $n \approx 2$.

В результате моделирования выявлена возможность подбора режима кристаллизации и его управления для получения поликристаллических ионных проводников с заданной зернистостью, обеспечивающей оптимальную проводимость.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колмогоров А.Н. "Изв.АН СССР, сер.мат.", 1937, № 3, с.353.
2. Белецкий В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. М.: Наука, 1980, 84с.

О РАЗРЕШИМОСТИ ОДНОЙ ДВУХТОЧЕЧНОЙ СИНГУЛЯРНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Г. Д. Гаприндашвили

Институт вычислительной математики им. Н. И. Мусхелишвили
380093, Акурская, 8.

Рассмотрена краевая задача

$$x'' = f(t, x, x'), \quad (1)$$

$$x(0+) = 0, \quad x(1-) = 0, \quad (2)$$

где $f:]0,1[\times \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ — непрерывная вектор-функция. Не